

МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ РАСЧЕТНЫХ СЕТОК ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЙ СОГЛАСОВАНИЯ НА ГРАНИЦАХ РАЗНЫХ ВЕЩЕСТВ

А. Н. Бахаев, Ю. А. Бондаренко

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

При расчете задач со сложными газодинамическими течениями в многослойных системах в процессе численного решения возникает проблема выбора разностной сетки.

Если область определения решения задачи состоит из нескольких областей, то помимо определенного числа интервалов, которое необходимо иметь в заданной области для нужной точности решения соответствующих дифференциальных уравнений, разностная сетка должна удовлетворять некоторым специальным условиям на границах, а внутри области шаги сетки должны быть близки к равномерным.

Сидоровым А. Ф. [1] был предложен алгоритм расчета оптимальных разностных сеток, позволяющий автоматически строить сетки, минимизирующий ее отклонение от равномерной.

Алгоритм МОПС (массовая оптимальная сетка) широко используется для построения «оптимальных» сеток в одномерных методиках [2]. Он основан на использовании минимизации функционала Сидорова А. Ф. Вариационная задача сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению, для которого получается аналитическое решение, из которого находятся распределения заданного числа точек по слоям.

На практике возникает другая задача построения «оптимальной» сетки с заданным числом интервалов в каждом слое и с заданным условием согласования сетки на границах слоев. В данной работе показан один из способов ее решения.

Рассмотрим следующую задачу.

Пусть дан набор слоев $Q_l, l=1...L$. Вдоль слоев задана эйлерова сетка. В каждом слое дано число ячеек n_l . Даны размеры слоев в эйлеровых координатах

$$\Delta R_l = \sum_{j=1}^{n_l} \left| \bar{z}_j^l - \bar{z}_{j-1}^l \right|,$$

массовые толщины:

$$\Delta M_l = \sum_{j=1}^{n_l} \rho_j \left| \bar{z}_j^l - \bar{z}_{j-1}^l \right|,$$

координаты границ слоев:

$$\begin{cases} \bar{z}_0^l = \bar{z}_{n_l-1}^{l-1}; \\ \bar{z}_{n_l}^l = \bar{z}_0^{l+1}. \end{cases}$$

Критерий согласования определен заданной функцией $g = \{g_j^l\}$ – в эйлеровых координатах и функцией

$$G = \{G_j^l\} \text{ – в массовых координатах.}$$

С точки зрения сетки с метрикой по расстоянию критерий согласования сетки означает, что ищется минимум функционала

$$\sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^{n_l-1} \left[\frac{\left| \bar{z}_{j+1}^l - \bar{z}_j^l \right|}{\left| \bar{z}_j^l - \bar{z}_{j-1}^l \right|} - g_j^l \right]^2 \rightarrow \min \quad (1)$$

с ограничениями

$$\frac{\left| \bar{z}_1^{l+1} - \bar{z}_0^{l+1} \right|}{\left| \bar{z}_{n_l}^l - \bar{z}_{n_l-1}^l \right|} = g_0^{l+1} = g_{N_l}^l.$$

Для массовых координат функционал примет следующий вид:

$$\sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^{n_l-1} \left[\frac{\rho_{j+1/2}^l \left| \bar{z}_{j+1}^l - \bar{z}_j^l \right|}{\rho_{j-1/2}^l \left| \bar{z}_j^l - \bar{z}_{j-1}^l \right|} - G_j^l \right]^2 \rightarrow \min$$

$$\frac{\rho_{1/2}^l \left| \bar{z}_1^{l+1} - \bar{z}_0^{l+1} \right|}{\rho_{n_l-1/2}^l \left| \bar{z}_{n_l}^l - \bar{z}_{n_l-1}^l \right|} = G_0^{l+1} = G_{N_l}^l.$$

Сеточная функция g_j , которая определена в узлах сетки, есть отношение некоторых сеточных величин, определенных в ячейках. Пусть это отношение квадратных корней из плотности, т. е. считаем, что

$$g_j^l = \frac{H_{j+1/2}^l}{H_{j-1/2}^l}, \quad j = 1, 2, \dots, n_l - 1;$$

$$H_{j+1/2}^l = \sqrt{\rho_{j+1/2}^l}$$

условие на границах областей

$$g_0^{l+1} = g_{n_l}^l = \frac{H_{1/2}^l}{H_{n_l-1/2}^l}.$$

Тогда функционал (1) переписывается в виде

$$\sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^{n_l-1} \left[\frac{\left| \bar{z}_{j+1}^l - \bar{z}_j^l \right|}{H_{j+1/2}^l} - 1 \right]^2 \rightarrow \min,$$

ограничение

$$\frac{\left| \bar{z}_1^{l+1} - \bar{z}_0^{l+1} \right|}{H_{1/2}^{l+1}} = \frac{\left| \bar{z}_{n_l}^l - \bar{z}_{n_l-1}^l \right|}{H_{n_l-1/2}^l}.$$

Далее обозначим

$$\frac{\left| \bar{z}_j^l - \bar{z}_{j-1}^l \right|}{H_{j-1/2}^l} = h_{j-1/2}^l, j = 1, \dots, n_l; \quad (2)$$

$$\Delta H_l = \sum_{j=1}^{n_l} h_{j-1/2}^l. \quad (3)$$

Тогда получаем следующую вариационную задачу:

$$\begin{cases} \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^{n_l-1} \left[\frac{h_{j+1/2}^l}{h_{j-1/2}^l} - 1 \right]^2 \rightarrow \min, \\ h_{1/2}^{l+1} = h_{n_l-1/2}^l, l = 1, \dots, L-1 - \text{условие на стыках,} \\ \sum_{j=1}^{n_l} h_{j-1/2}^l = \Delta H_l, l = 1, \dots, L - \text{изопериметрическое условие.} \end{cases} \quad (4)$$

Перейдем от дискретной функции $h_{j+1/2}^l$ к непрерывной кусочно-гладкой функции $h_j^l, j \in [0, n_l]$. Вариационная задача (4) примет вид

$$\sum_{l=1}^L \int_0^{n_l} \left(\frac{h_j^l}{h_j} \right)^2 dj \rightarrow \min; \quad (5)$$

$$h^{l+1}(0) = h^l(n_l), l = 1, \dots, L-1; \quad (6)$$

$$\int_0^{n_l} h^l(j) dj = \Delta H_l, l = 1, \dots, L. \quad (7)$$

Таким образом, необходимо найти функцию $h_j^l, j \in [0, n_l]$, доставляющую минимум функционалу (5) и удовлетворяющую соотношениям (6) и (7).

Эта задача является изопериметрической задачей вариационного исчисления. Граничные условия для функции h_j^l , вообще говоря, неизвестны, и поэтому эта задача является задачей на свободный экстремум.

Для отдельной области предполагается знание ее граничных интервалов, и для нее строго решается изопериметрическая задача с граничными условиями. Ниже коротко опишем алгоритм ее решения из статьи [1].

Рассмотрим построение сетки в отдельной области Q , массой M и с числом интервалов n рис. 1.

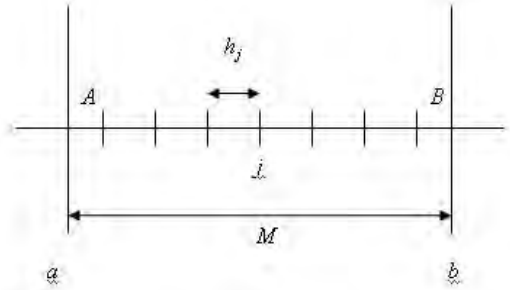


Рис. 1. Схематичное изображение области

При этом предполагаем, что граничные значения функции h_j , определенной на интервале $[a, b]$, известны

$$\begin{aligned} h(a) &= A, \\ h(b) &= B. \end{aligned} \quad (8)$$

Будем решать обычную изопериметрическую задачу для функционала I

$$I = \int_a^b \left(\frac{h'}{h} \right)^2 dj \rightarrow \min. \quad (9)$$

С граничными условиями (8) и изопериметрическим условием

$$\int_a^b h dj = M. \quad (10)$$

Далее, решение вариационной задачи (8)–(10) сводится к дифференциальному уравнению, интегрируя которое получаем два возможных представления для функции h_j

$$h = \frac{a_1}{\cos^2(a_2 j + a_3)}; \quad (11)$$

$$h = \frac{\delta \alpha e^{\beta x}}{(\delta \alpha e^{\beta x})^2}, \quad (12)$$

где $a_1, a_2, a_3, \alpha, \beta, \delta$ – постоянные, которые определяются из граничных условий (8).

Системы уравнений для определения этих параметров сводятся к двум уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{\sin z}{z} &= \xi, \\ \frac{shz}{z} &= \xi, \end{aligned} \quad (13)$$

где ξ – основной управляющий параметр

$$\xi = \frac{M - A - B}{(n - 2)\sqrt{AB}}. \quad (14)$$

Уравнения (11), (12) решаются методом Ньютона. Таким образом, решая уравнения (11), (12) и определяя ξ , предварительные массы ячеек определяются по формулам:

1. При $\xi < 1 - \varepsilon$, $\varepsilon = 10^{-3}$

$$\mu_j = \frac{A(n-2)\cos^2 b}{a} \left[\operatorname{tg} \left(\frac{a(i-1)}{n-2} + b \right) - \operatorname{tg} \left(\frac{a(i-2)}{n-2} + b \right) \right], i = 2, \dots, n-1. \quad (15)$$

2. При $\xi > 1 + \varepsilon$

$$\mu_i = \frac{A(n-2)(\beta+1)^2}{2\alpha\beta} \left[\frac{1}{\beta e^{\frac{2\alpha(i-2)}{n-2}} + 1} - \frac{1}{\beta e^{\frac{2\alpha(i-1)}{n-2}} + 1} \right], i = 2, \dots, n-1. \quad (16)$$

3. При $|\xi - 1| \leq \varepsilon$

$$\mu_i = \frac{(M - A - B)}{\left[(\sqrt{A} - \sqrt{B})(i-2) + (n-2)\sqrt{B} \right] \left[(\sqrt{A} - \sqrt{B})(i-1) + (n-2)\sqrt{B} \right]}. \quad (17)$$

Затем сетка корректируется, чтобы получить правильную сумму масс ячеек

$$\Delta = M - \sum_{i=1}^n \mu_i. \quad (18)$$

И окончательные массы ячеек определяются формулами

$$m_1 = A,$$

$$m_n = B,$$

$$m_j = \mu_j + \frac{\Delta}{n-2}, i = 2, \dots, n-1.$$

Таким образом, находится решение вариационной задачи (8)–(10).

Покажем, как описанный выше алгоритм используется для согласования сетки по заданному критерию на границах слоев. Для этого рассмотрим следующую простую задачу: имеется три области (см. рис. 2) с разными плотностями ρ_1, ρ_2, ρ_3 соответственно и равномерной сеткой, N – число точек по оси X (столбцы), M – число точек по оси Y (строки).

Необходимо, применяя модифицированный алгоритм МОПС, построить сетку таким образом, чтобы отношение размеров ячеек на стыках областей удовлетворяло некоторому выбранному критерию, а сетка внутри областей была монотонной. В качестве критерия выберем отношение квадратных корней из плотностей – рис. 3. Теоретическое обоснование применимости этого критерия можно найти, например, в статье [3]

$$\frac{\Delta r_i}{\Delta r_{i+1}} = \sqrt{\frac{\rho_{i+1}}{\rho_i}}. \quad (19)$$

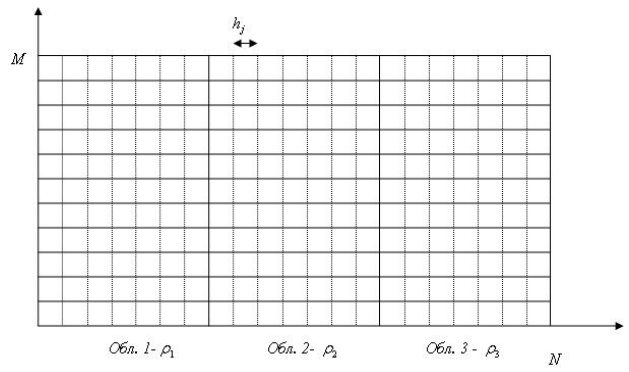


Рис. 2. Расчетная сетка для трех областей

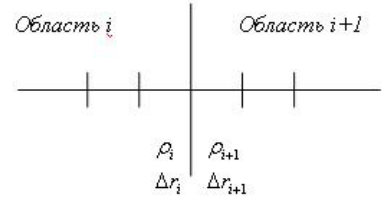


Рис. 3. Граница между областями

Полагаем, что начальная сетка равномерная по расстоянию и размеры левой ячейки A первой области и правой ячейки последней области B заданы и не меняются (см. рис. 1).

Опишем схему работу модифицированного алгоритма МОПС на примере вышеописанной задачи.

1. Строится сетка в первой области, в качестве граничных условий (6) используем первую ячейку первой области и первую ячейку следующей за ней области (см. рис. 4).

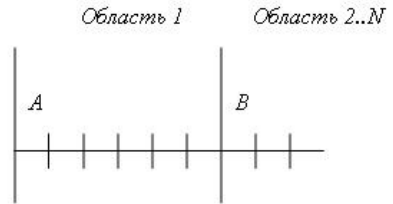


Рис. 4. Фрагмент области

2. Строится сетка во внутренних областях, в данном случае во 2-й области. В качестве граничных условий (6) используем последнюю ячейку предыдущей области и первую ячейку последующей области рис. 5.



Рис. 5. Фрагмент области

3. Строится сетка в последней области. В качестве граничных условий (6) используются последняя ячейка предыдущей области и последняя ячейка исковой области (см. рис. 6).

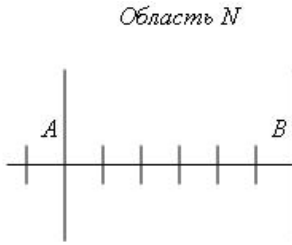


Рис. 6. Фрагмент области

4. Пункты 1–2–3 повторяются, но уже для обратного хода по сетке, справа-налево.

5. Проход n итерация пункты 1–5 до достижения необходимой точности.

На рис. 7 демонстрируется согласованная сетка. На рис. 8 отображены значения обобщенных знаменателей

$$q_{об} = \frac{\Delta r_{i+1} \sqrt{\rho_{i+1}}}{\Delta r_i \sqrt{\rho_i}}.$$

Скачки знаменателей на границах слоев объясняются тем, что граничные условия стремятся выправить знаменатель к единице.

В программе был реализован критерий согласования (19), однако можно применить любой другой критерий согласования, например с учетом скорости звука, или равномерно по массе, существенно не изменяя алгоритм программы.

В докладе описана первая попытка применения метода МОПС для построения расчетных сеток, с заданным критерием согласования сетки на внутренних границах и с заданным числом точек в слоях.

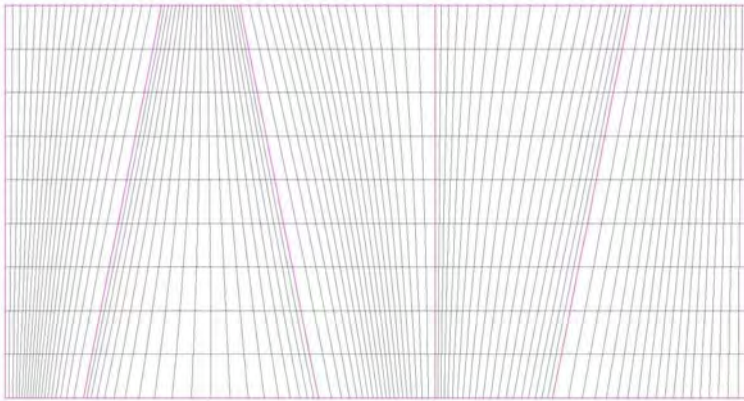


Рис. 7. Согласованная сетка

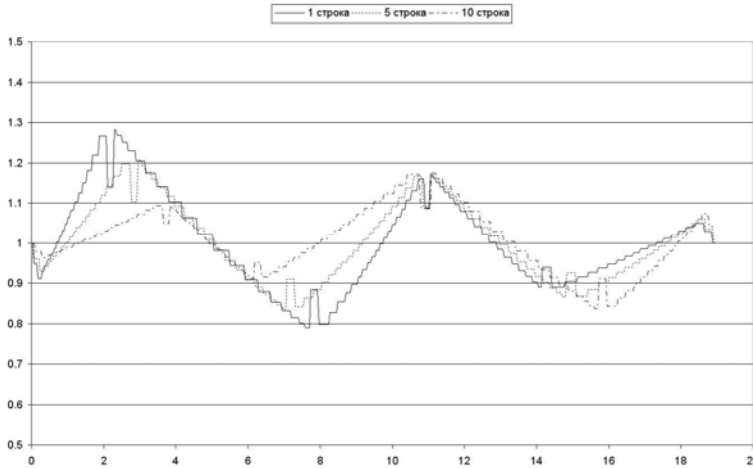


Рис. 8. График значений обобщенных знаменателей

Литература

1. Сидоров А. Ф. Об одном алгоритме расчета оптимальных разностных сеток // Тр. Мат. ин-та им. В. А. Стеклова АН СССР. 1966. Т. 74. С. 147–151.

2. Софронов И. Д. // ВАНТ. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1978. Вып 1(1). С. 3–6.

3. Куропатенко В. Ф. О разностных методах для уравнений гидродинамики // Тр. Мат. ин-та им. В. А. Стеклова АН СССР. 1966. Т. 74. С. 107–137.

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ЛОГОС. МОДУЛЬ РАСЧЕТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

А. Ю. Вишняков, В. А. Глазунов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

В инженерном анализе одна из основных проблем связана с автоматическим построением расчетной модели (сетки) для произвольных областей. Существующие сеточные генераторы строят, как правило, неструктурированные сетки. Это приводит к необходимости создания вычислительных алгоритмов на неструктурированных сетках. В данной работе, в соответствии с техническим заданием на создание пакета программ решения на параллельных ЭВМ задач теплопереноса, созданы алгоритмы решения нестационарных задач теплопереноса в твердотельных конструкциях и/или неподвижных жидкостях и газах на неструктурированных сетках. Расчетные методики построены на основе метода конечного объема, неявной и явной дискретизации потока тепла через грани ячеек.

Приводятся три алгоритма определения потока тепла через грани ячеек, реализованных программно: метод с отложенной коррекцией, градиентный метод и метод наименьших квадратов. Текущая версия модуля включает в себя такие физические процессы, как горение взрывчатых веществ, распространение тепла с учетом фазовых переходов, перенос тепла излучением в прозрачных средах, объемное тепловыделение.

Основное положение теории теплопроводности, известное как закон Фурье, состоит в предположении пропорциональности теплового потока градиенту температуры в однородной неподвижной среде [1, 2]

$$\vec{q} = -\chi \text{grad} T, \quad (1)$$

где T – температура, а χ – коэффициент теплопроводности вещества.

Уравнение сохранения энергии в изотропной среде при отсутствии деформаций записывается в виде

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\text{div}(q) + \rho Q_T. \quad (2)$$

Здесь ρ – плотность, E – внутренняя удельная энергия вещества, Q_T – мощность внутренних источников теплоты.

Подстановка выражения для потока тепла (1) в уравнение (2) приводит к основному дифференциальному уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = \text{div}(\chi \text{grad} T) + \rho Q_T. \quad (3)$$

В теплофизических исследованиях обычно полагается, что теплофизические свойства для каждого материала (плотность, внутренняя энергия и коэф-

фициент теплопроводности) являются функциями температуры

$$\begin{aligned} \rho &= \rho(T), \\ E &= E(T), \\ \chi &= \chi(T). \end{aligned} \quad (4)$$

При рассмотрении теплопроводности в твердом теле пренебрегается изменением плотности, а уравнение теплопроводности записывается в виде

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\chi \text{grad} T) + \rho Q_T, \quad (5)$$

где $C_P = C_P(T)$ – удельная теплоемкость.

Область, в которой отыскивается решение, может состоять из некоторого набора сред с различными теплофизическими свойствами. Естественными условиями сопряжения на криволинейной границе ($G(x, y, z) = 0$) контакта двух сред являются условия непрерывности температуры и теплового потока

$$[T] = 0, \quad (x, y, z) \in G; \quad (6)$$

$$\left[\chi \frac{\partial T}{\partial n} \right] = 0, \quad (x, y, z) \in G. \quad (7)$$

Текущая версия модуля включает в себя такие физические процессы, как горение взрывчатых веществ, распространение тепла с учетом фазовых переходов, перенос тепла излучением в прозрачных средах, объемное тепловыделение.

В задачах плавления и затвердевания (задача Стефана) на каждый момент времени определяется криволинейная подвижная поверхность ($F(t, x, y, z) = 0$), на которой происходит фазовый переход. В такого рода задачах появляется необходимость расчета границы фазового перехода. Положение границы фазового перехода определяется из условия

$$T(t, x, y, z) = T^*, \quad (t, x, y, z) \in F, \quad (8)$$

где T^* – температура фазового перехода.

Фазовый переход сопровождается выделением либо поглощением определенного количества тепла. На границе фазового перехода разность тепловых потоков определяет количество тепла, затрачиваемое на фазовый переход, поэтому условия сопряжения принимают вид

$$[T] = 0, \quad (t, x, y, z) \in F; \quad (9)$$

$$\left[\chi \frac{\partial T}{\partial n} \right] = \rho H V_n, \quad (t, x, y, z) \in F, \quad (10)$$

где H – удельная энтальпия фазового перехода, а V_n – скорость движения границы фазового перехода по нормали к поверхности. Теплофизические свойства различных агрегатных состояний вещества с разных сторон от фазового фронта в общем случае различны. Задача Стефана допускает обобщенную формулировку [3, 4], при которой условия (9)–(10) включаются в уравнение теплопроводности

$$\left(\rho C_P + \rho H \delta(T - T^*) \right) \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\chi \operatorname{grad} T) + \rho Q_T, \quad (11)$$

где $\delta(T - T^*)$ – дельта-функция Дирака.

Функция Q_T , задающая внутренний источник теплоты, является функцией времени и точки. Обычно в теплофизических задачах эта функция связана с конкретным веществом. Сама функция задается либо таблично, либо функцией от параметров точки.

В задачах нагрева и воспламенения взрывчатых веществ функция внутреннего источника теплоты зависит от концентрации разложившегося вещества и записывается в виде

$$Q_T = Q_{\text{ВВ}} \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (12)$$

где $Q_{\text{ВВ}}$ – теплота разложения вещества, а C – массовая концентрация вещества. Кинетика разложения описывается по закону Аррениуса [5, 6], где массовая концентрация вещества выражается следующим образом:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -K \exp\left\{ -\frac{E^*}{RT} \right\} C, \quad (13)$$

где E^* – энергия активации, K – скорость разложения вещества (частотный множитель), R – газовая постоянная.

Для однозначного определения температуры ставятся начальные и граничные условия. В начальный момент времени задается распределение температуры в области

$$T(\vec{R}, 0) = T_0(\vec{R}), \quad \vec{R} \in \Omega. \quad (14)$$

На границах цилиндра

$\Sigma = \{(x, y, z, t) : (x, y, z) \in \partial\Omega, 0 < t < t_{\text{end}}\}$ могут быть поставлены следующие граничные условия:

- задана температура

$$T = T_{\Sigma}(\vec{R}, t), \quad (\vec{R}, t) \in \Sigma; \quad (15)$$

- задан тепловой поток

$$-\left(\chi \frac{\partial T}{\partial n} \right) = q_{\Sigma}(\vec{R}, t), \quad (\vec{R}, t) \in \Sigma, \quad (16)$$

где $q_{\Sigma}(\vec{R}, t)$ – заданный поток тепла в направлении внешней нормали к поверхности Σ ;

- задан конвективный теплообмен:

$$-\left(\chi \frac{\partial T}{\partial n} \right) = \alpha(T - T_{\Sigma}(\vec{R}, t)), \quad (\vec{R}, t) \in \Sigma, \quad (17)$$

где $T_{\Sigma}(\vec{R}, t)$ – заданная температура окружающей среды у поверхности Σ , α – коэффициент конвективного теплообмена;

При решении сопряженных задач теплообмена излучением в прозрачных средах тепловой поток на границе области определяется как разность собственного излучения $J^+(\vec{R}, t)$ и падающего излучения $J^-(\vec{R}, t)$

$$q_{\Sigma}(\vec{R}, t) = J^+(\vec{R}, t) - J^-(\vec{R}, t), \quad (\vec{R}, t) \in \Sigma. \quad (18)$$

Плотность теплового потока, определяется по закону Стефана – Больцмана

$$J = \sigma T^4, \quad (19)$$

где σ – постоянная Стефана – Больцмана.

Поскольку реальные твердые тела не полностью поглощают излучение, то значение теплового потока определяется с учетом степени черноты поверхности $\varepsilon = \varepsilon(T, \vec{R}, t)$, ($\varepsilon < 1$)

$$J = \varepsilon \sigma T^4. \quad (20)$$

В случае одного тела падающий тепловой поток может быть выражен через функцию температуры излучения

$$J^+ = \varepsilon \sigma T_{\Sigma}^4(\vec{R}, t). \quad (21)$$

В этом случае граничное условие теплообмена с учетом закона Стефана – Больцмана и окружающей среды может быть записано в виде

$$-\left(\chi \frac{\partial T}{\partial n} \right) = \varepsilon \sigma (T^4 - T_{\Sigma}^4(\vec{R}, t)) = J^+ - J^-, \quad (\vec{R}, t) \in \Sigma. \quad (22)$$

При учете конвективного теплообмена с окружающей средой и теплообмена излучением граничное условие принимает вид

$$-\left(\chi \frac{\partial T}{\partial n} \right) = \alpha(T - T_{\Sigma}(\vec{R}, t)) + \varepsilon \sigma (T^4 - T_{\Sigma}^4(\vec{R}, t)), \quad (\vec{R}, t) \in \Sigma. \quad (23)$$

Это условие можно записать как условие конвективного теплообмена (23) с нелинейным коэффициентом теплообмена

$$-\left(\chi \frac{\partial T}{\partial n} \right) = \tilde{\alpha}(T - T_{\Sigma}(\vec{R}, t)), \quad (\vec{R}, t) \in \Sigma, \quad (24)$$

где

$$\tilde{\alpha} = \alpha + \varepsilon \sigma (T + T_{\Sigma})(T^2 + T_{\Sigma}^2). \quad (25)$$

В случае расчета радиационного теплообмена многих тел, разделенных прозрачной для излучения средой, падающий тепловой поток на границе облас-

ти определяется не только температурой окружающей среды, но и излучением других тел (см. рис. 1). Также при радиационном теплообмене одного тела, имеющего прозрачные для излучения полости или невыпуклые поверхности, необходимо учитывать собственное излучение поверхности тела по всем видимым направлениям. Результирующий поток излучения в точке поверхности складывается из потока собственного излучения и поглощаемого потока. Интегральное уравнение, выражающее закон сохранения энергии и описывающее перенос излучения через оптически прозрачную область, ограниченную поверхностью ∂G , излучающую по закону Ламберта, имеет вид

$$q_{\Sigma}(\bar{R}_p, t) = \sigma T^4(\bar{R}_p, t) - \frac{1}{\pi} \int_{\partial G'} \sigma T^4(\bar{R}_f, t) \frac{\cos(\bar{n}_p, \Delta\bar{R}_{pf}) \cos(\bar{n}_f, \Delta\bar{R}_{pf})}{|\Delta\bar{R}_{pf}|^2} dS, \quad (26)$$

где $\cos(\bar{n}_p, \Delta\bar{R}_{pf})$ – косинус угла между нормалью в точке p и отрезком $\Delta\bar{R}_{pf}$, соединяющим точки p и f ; $\cos(\bar{n}_f, \Delta\bar{R}_{pf})$ – косинус угла между нормалью в точке f и отрезком, соединяющим точки p и f ; $|\Delta\bar{R}_{pf}|$ – расстояние между точками p и f . В формуле (26) интегрирование ведется по части поверхности $\partial G'$, которая является частью граничных поверхностей ∂G , видной из точки p .

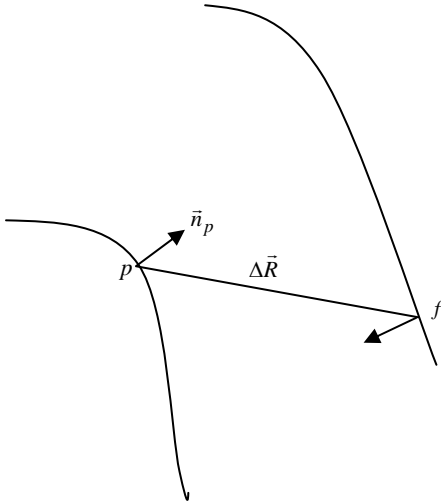


Рис. 1. Схема переноса излучения

Таким образом, сопряженная задача теплообмена излучением с учетом конвективного теплообмена с окружающей средой сводится к определению теплового поля внутри тел на основе решения уравнения теплопроводности с граничным условием

$$-\left(\chi \frac{\partial T}{\partial n}\right) = \alpha(T - T_{\Sigma}(\bar{R}, t)) + q_{\Sigma}(\bar{R}_p, t), \quad (\bar{R}, t) \in \Sigma, \quad (27)$$

где тепловой поток $q_{\Sigma}(\bar{R}_p, t)$ определяется по (26), а $T_{\Sigma}(\bar{R}, t)$ – температура окружающей среды.

При численном решении выражение для теплового потока (26) удобно представить в виде разности двух потоков (18), где $J^+(P, t)$ – односторонний поток излучения в направлении внешней нормали к поверхности, $J^-(P, t)$ – односторонний поток излучения в направлении внутренней нормали к поверхности. Односторонний поток J^+ в любой точке на поверхности определяется по значению температуры в этой точке по формуле (20). Односторонний поток поглощенного излучения J^- определяется по формуле

$$J^-(\bar{R}_p, t) = \frac{1}{\pi} \int_{\partial G'} J^+(\bar{R}_f, t) \frac{\cos(\bar{n}_p, \Delta\bar{R}_{pf}) \cos(\bar{n}_f, \Delta\bar{R}_{pf})}{|\Delta\bar{R}_{pf}|^2} dS \frac{1}{\pi}.$$

Расчет температурного поля осуществляется в течение интервала времени $0 \leq t \leq t_{end}$ в некоторой области пространства $\bar{R} \in \Omega$, ограниченной поверхностью $\partial\Omega$. Поэтому решение уравнения теплопроводности ищется в цилиндре

$$\square = \{(x, y, z, t) : (x, y, z) \in \Omega, 0 < t < t_{end}\}. \quad (28)$$

Как уже отмечалось выше, приводятся три алгоритма определения потока тепла через грани ячеек, реализованных программно: метод с отложенной коррекцией, градиентный метод и метод наименьших квадратов.

В методе с отложенной коррекцией рассматривается изотропная теплопроводность, где производная от температуры по нормали в центре грани аппроксимируется на неструктурированной сетке с учетом вычисленного в ячейках сетки значения градиента температуры, который определяется по формуле Гаусса. При неявной аппроксимации потока тепла значение градиента температуры в ячейках определяется по температуре с предыдущей итерации (отложенная коррекция). Тепловые потоки на гранях определяются из условия непрерывности потока, что приводит к гармоническому усреднению коэффициента теплопроводности. Разностная схема записывается с весовыми параметрами: $(0 \leq \sigma_t \leq 1)$ и $(0 \leq \sigma_d \leq 1)$. На равномерной ортогональной сетке полностью неявная схема $(\sigma_d = 1)$ имеет второй порядок аппроксимации по пространству и первый $(\sigma_t = 0)$ либо второй $(\sigma_t = 1)$ по времени.

Считая, что в точках P' , F' и в центре грани известна температура (рис. 2), тогда поток через грань в направлении нормали от точки P к точке F можно определить из условия непрерывности потока на грани

$$\chi_f \left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_f \Delta S_f = \chi_{f-} \frac{T_f - T_{P'}}{|\Delta\bar{R}_{P',f}|} \Delta S_f = \chi_{f+} \frac{T_{F'} - T_f}{|\Delta\bar{R}_{F',f}|} \Delta S_f, \quad (29)$$

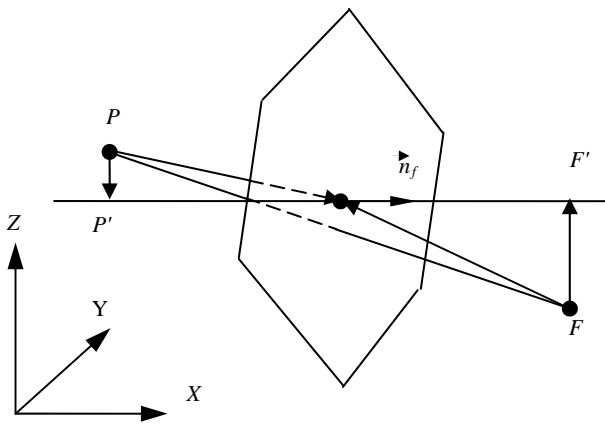


Рис. 2. Шаблон точек для аппроксимации потока на внутренней грани

где χ_{f^-} и χ_{f^+} – значения коэффициентов теплопроводности слева и справа от грани.

Значения температур в точках $T_{P'}$ и T_F ,

$$T_{P'(F')} = T_{P(F)} + \left((\text{grad}T)_{P(F)} \Delta \vec{R}_{PP'(FF')} \right). \quad (30)$$

Результирующий тепловой поток выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} & \chi_f \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_f^{\gamma+1} \Delta S_f = \\ & = \sigma \frac{\chi_f^\gamma \Delta S_f}{|\Delta \vec{R}_{P'F}|} \left(T_F^{\gamma+1} - T_{P'}^{\gamma+1} + \left((\text{grad}T)_F^\gamma \Delta \vec{R}_{FF'} \right) - \left((\text{grad}T)_{P'}^\gamma \Delta \vec{R}_{PP'} \right) \right). \end{aligned} \quad (31)$$

К достоинствам метода отложенной коррекции несомненно относится быстрое время счета, однако он применим только для изотропной теплопроводности и при счете по данному методу возникают осцилляции при решении на существенно косоугольных сетках.

Данный метод аппроксимации теплового потока является базовым методом в алгоритмах расчета вязких потоков в программе ЛОГОС. Аналогичный метод аппроксимации диффузионных потоков описан в [7–10] и является базовым алгоритмом во многих коммерческих пакетах программ, в частности, таких как STAR-CD, FLUENT, CFX и др.

В методе наименьших квадратов для расчета потоков тепла через грани ячеек рассматривается как изотропная, так и анизотропная теплопроводность. Для определения теплового потока в центре грани определяются значения градиентов температуры с разных сторон от грани. Значения градиентов определяются методом наименьших квадратов по ближайшим к грани ячейкам. Этими ячейками являются ячейки, у которых одна из вершин контрольного объема является узлом грани.

Значение градиентов температуры по группе ячеек с каждой из сторон грани

$$(\text{grad}T)_{f^\pm} = \begin{pmatrix} \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} (\Delta x_j)^2 & \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} \Delta x_j \Delta y_j & \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} \Delta x_j \Delta z_j \\ \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} \Delta x_j \Delta y_j & \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} (\Delta y_j)^2 & \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} \Delta y_j \Delta z_j \\ \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} \Delta x_j \Delta z_j & \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} \Delta y_j \Delta z_j & \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} (\Delta z_j)^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} \Delta x_j (T_j - T_f) \\ \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} \Delta y_j (T_j - T_f) \\ \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} \Delta z_j (T_j - T_f) \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Результирующий поток определяется из условий непрерывности потока и температуры в центре грани

$$\left(\left(\chi_f (\text{grad}T)_f \right) \vec{n}_f \right) \Delta S_f = \begin{pmatrix} \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} c_j T_j - \sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} c_j \frac{\sum_{i=P_{j1}}^{P_{jn}} c_j T_j - \sum_{i=F_{j1}}^{F_{jk}} d_i T_i}{\sum_{j=P_{j1}}^{P_{jn}} c_j - \sum_{j=F_{j1}}^{F_{jk}} d_j} \end{pmatrix} \Delta S_f. \quad (33)$$

Разностная схема записывается с весовыми параметрами: $0 \leq \sigma_t \leq 1$ и $0 \leq \sigma_d \leq 1$. Полностью неявная схема ($\sigma_d = 1$) имеет второй порядок аппроксимации по пространству и первый ($\sigma_t = 0$) либо второй ($\sigma_t = 1$) по времени.

В вычислительной математике методом наименьших квадратов определяется линейная функция, дающая наилучшее среднеквадратичное приближение к функции, заданной таблично [11]. По сути дела, методом наименьших квадратов находится гиперплоскость, которая ближе расположена к заданной группе точек. Градиент от гиперплоскости определяет значение градиента температуры.

Наконец, градиентный метод ориентирован также на расчет как изотропной, так и анизотропной теплопроводности. В этом методе определение теплового потока на грани состоит в определении градиента температуры в узлах разностной сетки и проецировании значения градиента из узлов в центр грани. Для определения градиента температуры в узлах строятся среднемиальные контрольные объемы относительно узлов разностной сетки. Значение градиента температуры в узлах определяется по формуле Гаусса

$$(\text{grad}T)_i = \frac{\iint_{\Sigma_i} T \vec{n} dS}{\iiint_{V_i} dV} = \frac{\sum_{P=1}^{P_{Cell}} (N_x, N_y, N_z)_{iP} T_P}{\Delta V_i}. \quad (34)$$

Стандартный способ проецирования градиента температуры из узлов в центр грани сводится к усреднению значений градиента по геометрическим характеристикам сетки, например, усреднением по контрольным объемам. Такое усреднение эквивалентно построению контрольного объема относительно центра грани. Этот контрольный объем получается объединением контрольных объемов относительно узлов разностной сетки, образующих грань. Соответственно, градиент температуры в центре грани определяется также по формуле Гаусса интегри-

рованием по поверхности контрольного объема, построенного относительно центра грани

$$(\text{grad}T)_f = \frac{\sum_{i=1}^I \sum_{P=1}^{P_{\text{cell}}} (N_x, N_y, N_z)_{iP} T_P}{\sum_{i=1}^I \Delta V_i} = \frac{\sum_{P=1}^{P_{\text{cell}}} (\tilde{N}_x, \tilde{N}_y, \tilde{N}_z)_P T_P}{\sum_{i=1}^I \Delta V_i} \quad (35)$$

Метод решения уравнения теплопроводности на неструктурированной сетке с определением градиента температуры в узлах сетки и проецированием его в центр грани был рассмотрен в работе [12]. В этой работе показано, что схема на равномерных структурированных и неструктурированных сетках имеет второй порядок аппроксимации по пространству. Исследованы также вопросы сходимости на примере двумерных задач. Данный метод для задачи Коши на равномерной декартовой сетке имеет два независимых решения (шахматный эффект). Для устранения этого недостатка в [12] предложено использовать весовые функции точки при определении значений градиента в узлах разностной сетки. Выбор весовых функций связан с гранью, на которой определяется затем градиент температуры.

Разностная схема записывается с весовыми параметрами: $0 \leq \sigma_t \leq 1$ и $0 \leq \sigma_d \leq 1$. Полностью неявная схема ($\sigma_d = 1$) имеет второй порядок аппроксимации по пространству и первый ($\sigma_t = 0$) либо второй ($\sigma_t = 1$) по времени.

Достоинствами метода наименьших квадратов и градиентного метода являются применимость для расчета как изотропной, так и анизотропной теплопроводности, большая точность на существенно косягольных сетках в сравнении с методом отложенной коррекции. Однако оба метода требуют больших временных затрат в сравнении с последним.

Метод аппроксимации тепловых потоков на гранях используется в ряде методик, в частности в методике НИМФА для решения задач фильтрации и моделирования диффузионных и дисперсионных процессов при описании массопереноса примесей на блочно-структурированных сетках.

Всю методику численного решения уравнения теплопроводности можно представить в виде следующих этапов:

1. Решение уравнения кинетики горения

$$C_P^{n+1} = \frac{C_P^n}{1 + \tau^n K \exp\left\{-\frac{T_E}{T_P^n}\right\}},$$

$$(Q_T)_P = -Q_{\text{ВВ}} \frac{C_P^{n+1} - C_P^n}{\tau}.$$

2. Расчет тепловых потоков излучением методом коэффициентов видимости

$$q_f = \sum a_{jf} J_j^-.$$

3. По одному из заданных методов аппроксимации потоков тепла на грани решаем уравнение теплопроводности:

- Рассчитываются правая часть СЛАУ и коэффициенты СЛАУ от аппроксимации производной по времени.

- Рассчитываются коэффициенты СЛАУ при аппроксимации потока тепла через грани ячеек.

- Решается уравнение $AT^{\gamma+1} = B^n + B^\gamma$.

Решение систем линейных алгебраических уравнений основано на использовании решателей библиотеки PMLP [13, 14].

Работоспособность модуля продемонстрирована на расчете ряда тестовых задач. Задачи решались как в скалярном, так и в многопроцессорном режиме. Проверялась эффективность распараллеливания, проводились расчеты с различными граничными условиями и различными вариациями дискретизации модели.

Литература

1. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. М.: Книжный дом ЛИБРОКОМ, 2009.
2. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977.
3. Самарский А. А., Моисеенко Б. Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВММФ. 1965. Т. 5, № 5. С. 816–827.
4. Будак Б. М., Соловьев Е. Н., Успенский А. Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задачи Стефана // Там же. С. 828–840.
5. Зельдович Я. Б., Компанец А. С. Теория детонации. М.: Государственное изд-во технико-теоретической литературы, 1955.
6. Мейдер Ч. Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
7. Ferziger J. H., Peric M. Computational methods for fluid dynamics. -3., rev. ed. - Berlin; New York; Barcelona; Hong Kong; London; Milan; Paris; Tokyo: Springer, 2002.
8. Jasak Hrvoj. Error analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows. 1996.
9. Jasak Hrvoj. Numerical Solution Algorithms for Compressible Flows. 2006
10. Schafer Michel. Computational Engineering-Introduction to Numerical Methods. Springer. 1996
11. Калиткин Н. Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.
12. Панов А. И. Методика решения уравнения теплопроводности на неструктурированной сетке // ВАНТ. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 2004. Вып. 4. С. 27–40.

13. Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г. и др. Реализованные методы решения разреженных линейных систем в библиотеке линейной алгебры // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2002. Вып. 2.

14. Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г. и др. Библиотека решателей разреженных систем // Труды ВНИИЭФ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004.