

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ЛУЧИСТОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МЕТОДОМ СГЛАЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

А. А. Лазарев¹, С. Н. Полищук², Б. П. Тихомиров²

¹СарФТИ НИЯУ МИФИ, г. Саров Нижегородской обл.
²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Метод сглаженных частиц SPH был предложен в 1977 году независимо Люси [1] и Джинголдоном и Моноганом [2] и получил практическое применение при решении широкого класса задач. Настоящая работа посвящена численному решению уравнения лучистой теплопроводности. При аппроксимации уравнения используется неявная схема. В работе рассмотрены алгоритмы реализации граничных условий. На примере ряда тестовых задач, имеющих аналитические решения, проведены результаты двумерных и трехмерных расчетов при варьировании числа частиц и радиуса сглаживания.

Расчеты проводились в рамках комплекса MPC [3], предназначенного для решения двумерных и трехмерных задач газовой динамики с теплопроводностью.

1. Постановка задачи

Рассматривается процесс распространения излучения в ограниченной области Ω . Уравнение теплопроводности, описывающее данный процесс в лучистом приближении, имеет следующий вид:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \vec{q} = Q, \quad (1)$$

$$\vec{q} = -\chi \operatorname{grad} T. \quad (2)$$

Здесь ε – удельная внутренняя энергия, t – время, ρ – плотность, \vec{q} – вектор теплового потока, T – температура, Q – тепловой источник, χ – коэффициент теплопроводности, который вычисляется по формуле:

$$\chi = \frac{4}{3} c \sigma \ell T^3,$$

где c – скорость света, σ – постоянная Стефана-Больцмана, ℓ – эффективный пробег излучения.

Дивергенция теплового потока \vec{q} для трехмерного течения в декартовой системе координат имеет следующий вид:

$$\operatorname{div} \vec{q} = -\left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\chi \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\chi \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right).$$

Для двумерного плоского ($v = 0$) и осесимметричного ($v = 1$) течения (2) запишется в виде:

$$\operatorname{div} \vec{q} = -\left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\chi \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1}{y^v} \frac{\partial}{\partial y} \left(y^v \chi \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right),$$

где (x, y) – соответственно декартовые или цилиндрические (x – ось симметрии) координаты точки.

Уравнение (1) дополняется соотношениями:

$$\varepsilon = \varepsilon(\rho, T),$$

$$\chi = \chi(\rho, T) \text{ или } l = l(\rho, T).$$

На границах области Ω заданы следующие условия:

- Температура $T_G(t, \vec{r})$:

$$T|_{\partial\Omega} = T_G; \quad (3)$$

- Поток $q_G(t, \vec{r})$:

$$(\vec{q} \cdot \vec{n})|_{\partial\Omega} = q_G, \quad (4)$$

где \vec{n} – единичный вектор нормали к границе области;

- условие симметрии.

2. Метод сглаженных частиц

Метод сглаженных частиц основан на интерполяции величин, определенных в заданных точках пространства. Сплошная среда заменяется дискретной системой расположенных в пространстве частиц. Уравнения сплошной среды записываются для каждой частицы, взаимодействующей с остальными частицами пространства.

Значение расчетной величины и ее градиента в методе SPH вычисляются по формулам:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho(\vec{r}_j)} f(\vec{r}_j) W(\vec{r} - \vec{r}_j, h).$$

$$\langle \operatorname{grad} f(\vec{r}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho(\vec{r}_j)} f(\vec{r}_j) \operatorname{grad} W(\vec{r} - \vec{r}_j, h), \quad (5)$$

где $\operatorname{grad} W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) = W'(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \frac{\vec{r} - \vec{r}_j}{|\vec{r} - \vec{r}_j|}$,

$W(\vec{r} - \vec{r}', h)$ – сглаживающая функция (ядро).

3. Дискретизация уравнения

Уравнение теплопроводности (1) для частицы с номером i в трехмерном случае имеет следующий вид:

$$\frac{d\varepsilon_i}{dt} + \frac{1}{\rho_i} \operatorname{div} \bar{q}_i = Q_i.$$

По формуле (5) запишем дискретизацию дивергенции вектора теплового потока:

$$\operatorname{div} \bar{q}_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \bar{q}_j \operatorname{grad} W_{ij} \cong 2 \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \bar{q}_{ij} \operatorname{grad} W_{ij},$$

где поток $\bar{q}_{ij} = \frac{1}{2}(\bar{q}_i + \bar{q}_j)$ вычисляется в точке $\bar{r}_{ij} = \frac{1}{2}(\bar{r}_i + \bar{r}_j)$.

Тогда уравнение переписывается в виде [4, 5]:

$$\frac{d\varepsilon_i}{dt} - 2 \sum_j \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \chi_{ij} W'_{ij} \frac{T_i - T_j}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} = Q_i, \quad (6)$$

где $W'_{ij} = W'_{ij}(\bar{r}_i - \bar{r}_j, h_{ij})$, $h_{ij} = \alpha(h_i + h_j)$, $\alpha = \frac{1}{2}$.

Используя аналогичные рассуждения, дискретный аналог уравнения теплопроводности для двумерного плоского и осесимметричного случая можно записать в следующем виде:

$$\frac{d\varepsilon_i}{dt} - 2 \sum_j \left(\frac{1}{2\pi} \left(\frac{y_{ij}}{y_i y_j} \right) \right)^v \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \chi_{ij} W'_{ij} \frac{T_i - T_j}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} = Q_i, \quad (7)$$

где $y_{ij} = \frac{1}{2}(y_i + y_j)$.

3.1. Усреднение коэффициента теплопроводности

Коэффициент теплопроводности χ_{ij} на границе взаимодействия частиц можно вычислить различными способами [6, 7], в частности:

1) арифметическое усреднение:

$$\chi_{ij} = \frac{1}{2}(\chi_i(\rho_i, T_i) + \chi_j(\rho_j, T_j)); \quad (8)$$

2) одна из модификаций гармонического усреднения:

$$\chi_{ij} = \frac{(\chi_i(\rho_i, T_i) + \chi_i(\rho_i, T_{ij})) \times (\chi_j(\rho_j, T_j) + (\chi_j(\rho_j, T_{ij})))}{(\chi_i(\rho_i, T_i) + \chi_i(\rho_i, T_{ij})) + (\chi_j(\rho_j, T_j) + (\chi_j(\rho_j, T_{ij})))}, \quad (9)$$

где $T_{ij} = 0,5 (T_i + T_j)$.

3.2. Неявная схема

Аппроксимируя уравнение (6) по неявной разностной схеме можно получить:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_i^{n+1} - \varepsilon_i^n) &= 2\tau \sum_j \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \times \\ &\times \chi_{ij} W'_{ij} \frac{T_i^{n+1} - T_j^{n+1}}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} + \tau Q_i^n \end{aligned} \quad (10)$$

Система уравнений (10) записана относительно двух неизвестных: удельной внутренней энергии ε^{n+1} и температуры T^{n+1} на слое по времени с номером $(n+1)$. Для решения системы линеаризуем ее по Ньютону (γ – номер итерации):

$$\begin{aligned} (\varepsilon_i^{\gamma+1} - \varepsilon_i^n) &= 2\tau \sum_j \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \chi_{ij}^\gamma W'_{ij} \times \\ &\times \frac{T_i^{\gamma+1} - T_j^{\gamma+1}}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} + \tau Q_i^n \end{aligned}, \quad (11)$$

$$\varepsilon_i^{\gamma+1} = \varepsilon_i^\gamma + \frac{\partial \varepsilon}{\partial T_i} \Big|^\gamma (T_i^{\gamma+1} - T_i^\gamma), \quad (12)$$

$$\varepsilon_i^\gamma \Big|_{\gamma=0} = \varepsilon_i^n, \quad T_i^\gamma \Big|_{\gamma=0} = T_i^n$$

Завершение итерационного процесса выполняется при удовлетворении по всем i следующего неравенства:

$$|T_i^{\gamma+1} - T_i^\gamma| < \varepsilon_{\text{отн}} |T_i^\gamma| + \varepsilon_{\text{абс}},$$

где $\varepsilon_{\text{отн}}$ и $\varepsilon_{\text{абс}}$ – значения соответственно относительной и абсолютной погрешностей.

Коэффициент теплопроводности χ^γ можно пересчитывать только на нескольких первых итерациях, остальные итерации проводятся при «замороженном» коэффициенте теплопроводности.

3.3. Реализация граничных условий

При реализации граничных условий используются «зеркальные» частицы, которые формируются посредством отражения ближайших счетных частиц от границы расчетной области.

Слагаемое, отвечающее за взаимодействие счетной частицы с номером i и «зеркальной» с номером j , согласно (11), имеет вид:

$$2\tau \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \tilde{\chi}_{ij}^\gamma W'_{ij} \frac{T_i^{\gamma+1} - T_j^{\gamma+1}}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|}.$$

Рассмотрим вид данного слагаемого для следующих граничных условий:

• Заданная температура. Значение температуры частицы с номером j заменяется на заданное значение температуры на границе T_G (3):

$$2\tau \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \tilde{\chi}_{ij}^\gamma W'_{ij} \frac{T_i^{\gamma+1} - T_G}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|}.$$

• Заданный поток. Вместо аппроксимации потока задается его значение q_G (4):

$$2\tau \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} W'_{ij} q_G.$$

• Симметрия. Значение температуры частицы с номером j заменяется на значение температуры ее счетного зеркального родителя j^* :

$$2\tau \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \tilde{\chi}_{ij}^{\gamma} W'_{ij} \frac{T_i^{\gamma+1} - T_{j^*}^{\gamma+1}}{|\bar{r}_i - \bar{r}_{j^*}|}.$$

4. Численные расчеты

При решении задач расстановка частиц в пространстве выполнялась равномерным образом. Радиус сглаживания частиц задавался постоянным и равным θd_0 , где θ – заданная константа, d_0 – начальное расстояние между частицами.

В качестве ядра используется сплайн третьей степени, значение производной по пространству для которого имеет следующий вид:

$$W'(\bar{r} - \bar{r}', h) = \frac{1}{N'} \begin{cases} -12R + 9R^2, & 0 < R < 1 \\ -3(2 - R)^2, & 1 \leq R < 2 \\ 0, & R \geq 2 \end{cases}$$

где $N' = 2,8\pi h^3$ для двумерного случая, $N' = 4\pi h^4$ – для трехмерного случая.

Решение системы линейных алгебраических уравнений на каждой итерации по нелинейности находится с использованием библиотеки решателей LParSol [8]. Параметры сходимости итераций по нелинейности заданы равными $\varepsilon_{отн} = 10^{-4}$ и $\varepsilon_{абс} = 10^{-8}$.

4.1. Распространение тепла от мгновенного точечного источника

Рассматривается задача распространения сферической тепловой волны от мгновенного точечного источника [9]. В начальный момент времени в точке $r = 0$ выделилась внутренняя энергия $\varepsilon = 10^5$. Уравнение состояния имеет следующий вид: $\varepsilon = c_v T$, $c_v = 1$, коэффициент теплопроводности задан формулой $\chi = T^\sigma$, $\sigma = 2$. Плотность среды $\rho = 1$.

Задача решалась в трехмерной постановке. Расчетная область представляет собой куб $-0,5 \leq x, y, z \leq 0,5$, в котором с равномерными шагами расстановки $d_0 = 0,015625$ (ансамбль № 1) и $d_0 = 0,078125$ (ансамбль № 2) размещены частицы. В частицах, попавших в сферу радиуса 0,015625, задана начальная внутренняя энергия 10^5 , в остальных частицах области внутренняя энергия равна нулю.

Расчеты проводились с усреднением коэффициента теплопроводности по формуле среднеарифметического усреднения (8). На рис. 1 и 2 приведены результаты расчетов с ансамблем частиц № 1 при $\theta = 1; 1,5; 2$. Из графиков видно, что на фронте тепловой волны при увеличении радиуса сглаживания наблюдается увеличение зоны размазывания. Погрешность при $\theta = 1; 1,5$ и 2 в точке инициализации источника составила соответственно 0,65 %, 0,26 % и 0,06 %.

На рис. 3 представлены результаты расчетов на сходимость при $\theta = 1$ с двумя ансамблями частиц. Погрешность в точке инициализации источника в расчете с ансамблем № 1 составила 0,34 %, с ансамблем № 2 – 0,2 %.

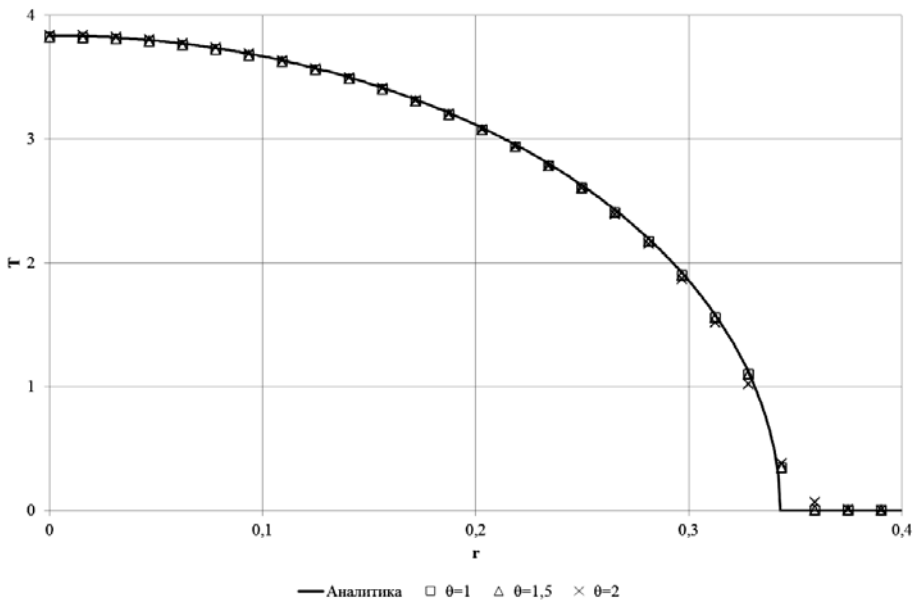


Рис. 1. Графики распределения температуры вдоль оси абсцисс

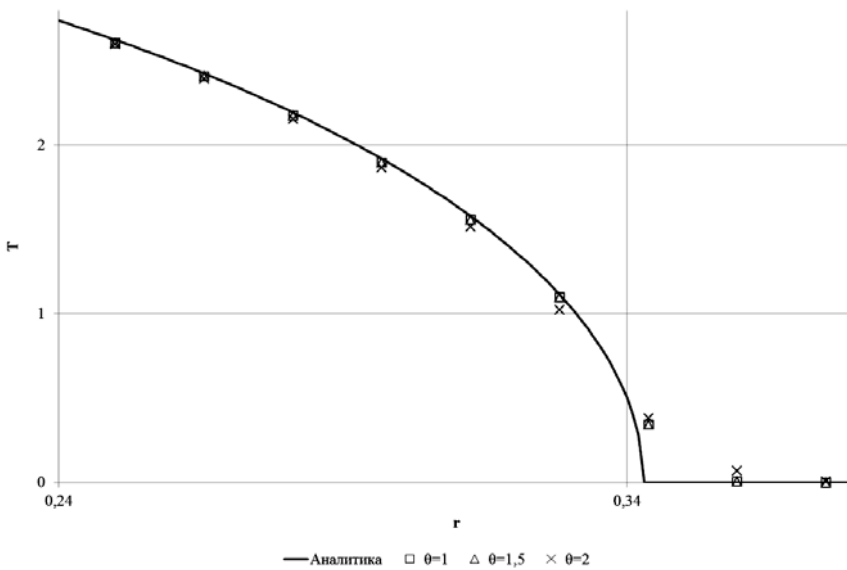


Рис. 2. Графики распределения температуры вдоль оси абсцисс в окрестности фронта волны

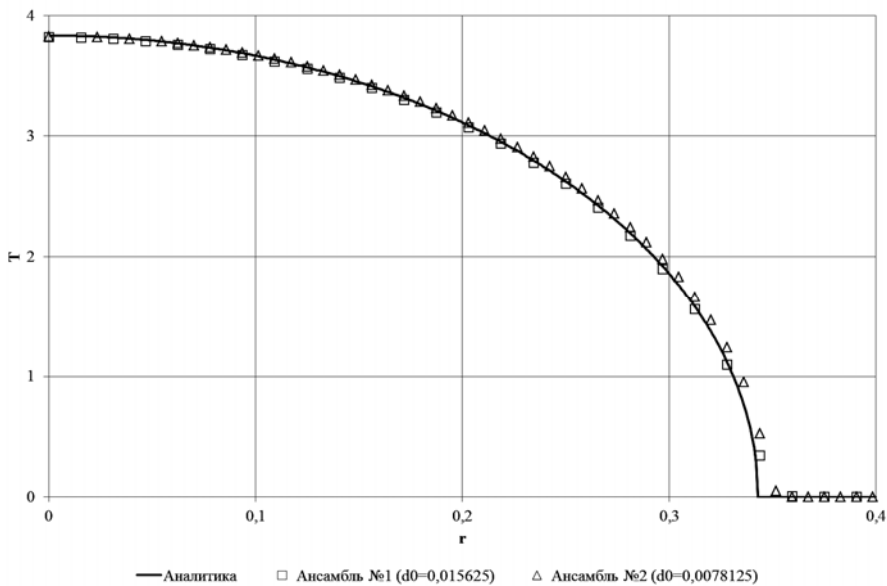


Рис. 3. Графики распределения температуры вдоль оси абсцисс при $\theta = 1$ с различными расстановками частиц в двумерном расчете

4.2. Распространение тепла от постоянно действующего источника

Рассматривается задача распространения сферической тепловой волны от постоянного действующего источника $Q(t, T) = \frac{3T}{2t}$.

Уравнение состояния имеет следующий вид: $\varepsilon = c_v T$, $c_v = 1$. Коэффициент теплопроводности $\chi = T^\sigma$, $\sigma = 4$. Плотность среды $\rho = 1$.

Задача решалась в двумерной осесимметричной и трехмерной постановках. Расчетная область по каждому координатному направлению задана в ин-

тервале $[0; 2,5]$. Частицы расставлены равномерным образом с шагом $d_0 = 0,05$. В частицах, расположенных внутри квадрата (куба) с размерами $[0; 0,1]$, задана начальная температура T_0 , которая для двумерного случая равна 1,1629541, а для трехмерного случая равна 0,913382.

Расчеты проводились с начального момента времени 0,00697. Усреднение коэффициента теплопроводности выполнялось по формуле гармонического усреднения (9). Параметр θ задан равным 1.

На рис. 4 представлено распределение температуры на момент времени 1,5 в двумерном и трехмерном расчетах.

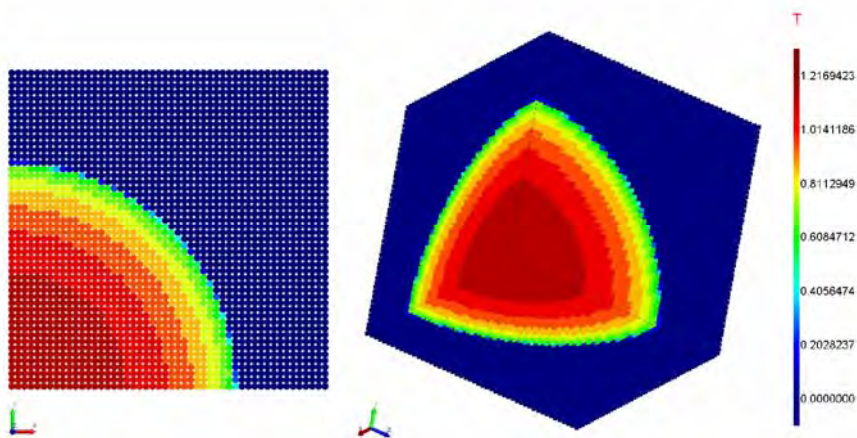


Рис. 4. Распределение температуры в двумерном и трехмерном расчетах

На рис. 5 показаны графики распределения температуры вдоль оси абсцисс в двумерном и трехмерном расчетах на момент времени 1,5. Из графиков видно хорошее согласие с аналитическим решением полученных численных решений. Погрешность в точке начальной инициализации источника в двумерном и трехмерном расчетах составила, соответственно, 0,19 % и 0,35 %.

4.3 Распространение тепловой волны в слоистой системе

Рассматривается плоская одномерная задача нагрева теплопроводного газа в слоистой системе: в первом слое $[0,10]$ плотность $\rho=1$, коэффициент теплопроводности $\chi = BT^\sigma, B=100, \sigma=5$; во втором слое $[10,10.6]$ – плотность $\rho=20$, коэффициент теплопроводности $\chi = BT^\sigma, B=5, \sigma=5$. На левой границе задана температура $T(t) = \left(\frac{t}{20}\right)^{0,2}$, на правой – поток тепла равен нулю.

Задача считалась в двумерной плоской постановке. Размеры расчетной области по оси абсцисс заданы равными $[0; 10,6]$, вдоль оси ординат – $[0; 0,1]$. В первом слое системы расстояние между частицами $d_0=0,02$, а во втором $d_0=0,01$.

Усреднение коэффициента теплопроводности в расчетах выполнялось по формуле гармонического усреднения (9). Параметр θ задан равным 1,5.

На рисунке 6 показаны распределения температуры вдоль оси абсцисс, полученные в расчетах с «заморозкой» коэффициента теплопроводности после первых двух итераций [10] по нелинейности и без его «заморозки», на момент времени 20. Из приведенного графика видно хорошее согласие численных решений. Отличие расчетных профилей температуры в численных расчетах не превышает 10^{-4} %. Максимальное отличие от аналитического решения не превышает 0,02 %.

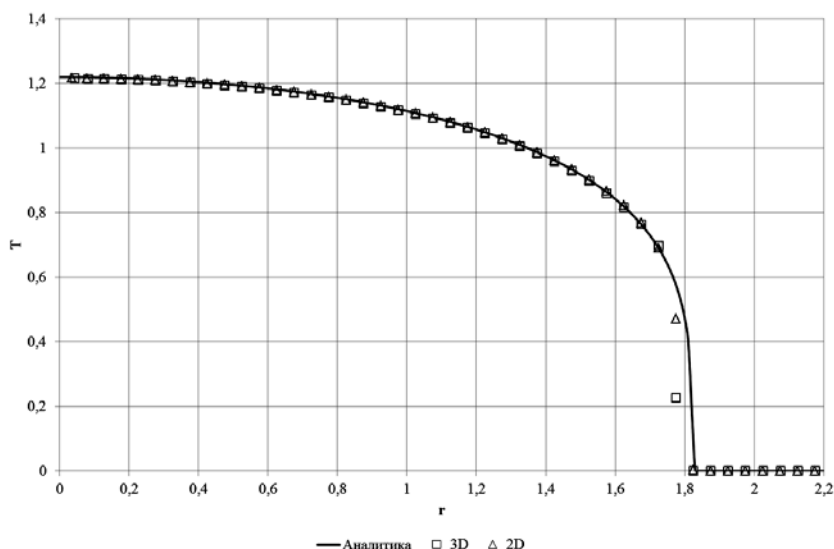


Рис. 5. Графики температуры вдоль оси абсцисс в двумерном и трехмерном расчетах

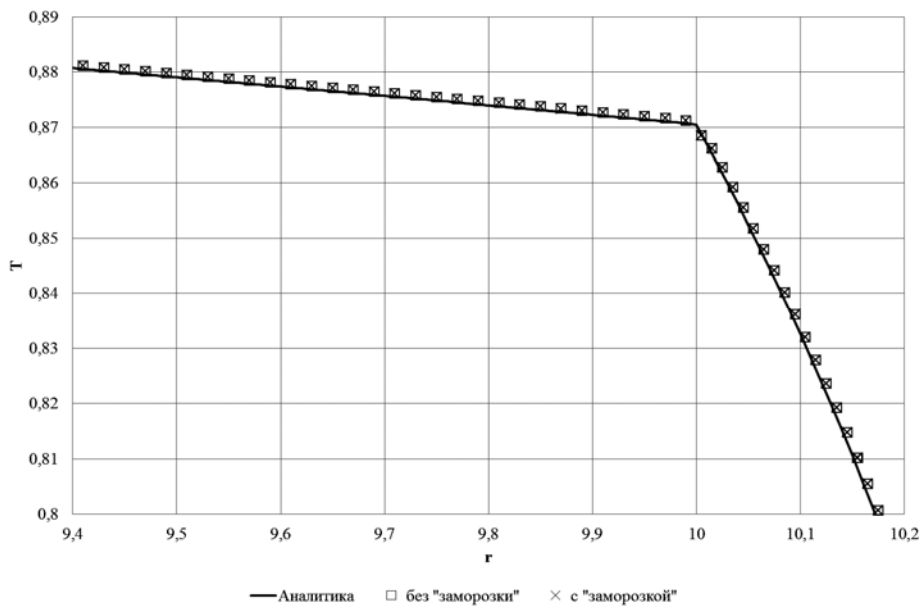


Рис. 6. Графики распределения температуры вдоль оси абсцисс в двумерных расчетах с «заморозкой» после первых двух итераций и без «заморозки» коэффициента теплопроводности

Заклучение

Представленный численный алгоритм решения уравнения лучистой теплопроводности методом SPH был опробован на решении тестовых задач в двумерной и трехмерной постановках. Во всех задачах получено хорошее согласие результатов численных расчетов и аналитических решений. В первой задаче продемонстрирована сходимость численных решений по числу частиц, и показано, что на фронте тепловой волны при увеличении радиуса сглаживания наблюдается увеличение зоны размазывания, что хорошо согласуется с теорией метода сглаженных частиц. Во второй задаче получено хорошее согласие численных решений задач в двумерной и трехмерной постановках. В третьей задаче показано, что численное решение с «замороженным» коэффициентом теплопроводности сопоставимо по точности с решением без «заморозки».

Литература

1. Lucy L. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis // *Astronom. J.* 1977. Vol. 82 P. 1013.
2. Gingold R. A., Monaghan J. J. Smoothed Particle Hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 1977. Vol. 181. P. 375–389.
3. Дерюгин Ю. Н., Полищук С. Н., Тихомиров Б. П. Расчет лучистой теплопроводности в методике МРСс использованием неточных методов Ньютона. Тезисы XV Международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование», С. 58–59. – Саров, ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2014.
4. Brookshaw L. A method of calculating radiative heat diffusion in particle simulations // *Proc. ASA* 6 (2), 1986. P. 207–210.

5. Cleary P. W., Monaghan J. J. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics // *Journal of Computational Physics* 148, 1999. P. 227–264.

6. Авдошина Е. В., Бондаренко Ю. А., Горбунов А. А., Дмитриева Ю. С., Наумов А. О., Проневич С. Н., Рудько Н. М., Тихомиров Б. П. Исследование точности различных методов усреднения коэффициента теплопроводности на стороне ячейки интегрирования при численном решении уравнения теплопроводности. // *ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов*. 2014. Вып. 3 С. 32–46.

7. Дмитриев Н. А., Софронов И. Д., Тихомиров Б. П. Методика расчета одномерных многообластных задач высокотемпературной газовой динамики // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики*. 1983. Вып. 3. С. 3–8.

8. Бартенев Ю. Г., Ерзунов В. А., Карпов А. П., Петров Д. А., Пищулин И. А., Стаканов А. Н., Щаникова Е. Б., Капорин И. Е., Милюкова О. Ю., Харченко С. А., Коньшин И. Н., Сысоев А. В., Мееров И. Б. Комплекс библиотек параллельных решателей SLAU LParSol версии 3: в сб. докладов XIV международной конференции «Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах». ПНИПУ, Пермь, 2014. С. 49–53.

9. Зельдович Ю. П., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. – М.: Наука, 1966. С. 519–523.

10. Бондаренко Ю. А., Горбунов А. А. Практические условия устойчивости для счета тепловых волн в неявных разностных схемах. // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*. 2008. Вып. 4. С. 3–12.