УДК 519.6

ПРАКТИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ УСТОЙЧИВОСТИ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ С ДВУКРАТНЫМ ПЕРЕСЧЕТОМ ЗНАЧЕНИЙ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Ю. А. Бондаренко, А. А. Горбунов, Б. П. Тихомиров
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Методом Фурье—Неймана в сочетании с численным методом Ньютона получено практически пригодное ограничение на шаг по времени для условно устойчивой схемы с двукратным пересчетом поля коэффициентов теплопроводности, применяемой для численного решения уравнения теплопроводности. Продемонстрировано, что зависимость шага по времени от шага пространственной сетки не является квадратичной.

Ключевые слова: лучистая теплопроводность, неявная разностная схема, коэффициент теплопроводности, устойчивость по начальным данным, метод Фурье—Неймана, итерационный метод Ньютона, шаг по времени, тестовые расчеты.

Введение

Рассмотрим уравнение квазилинейной диффузии

$$\frac{\partial E\left(U\right)}{\partial t} = -\mathrm{div}\, q, \qquad q = -\chi\left(U\right)\mathrm{grad}\, U$$

(U — температура; $E = E(U)$ — внутренняя энергия; $\chi = \chi\left(U\right)$ — коэффициент теплопроводности; t — время) с обычными ограничениями $\dfrac{\partial E}{\partial U} > 0$, $\dfrac{\partial \chi}{\partial U} > 0$ для $U > 0$; $E(0) = 0$; $\chi(0) = 0$, при выполнении которых возможны решения типа тепловых волн с конечной скоростью распространения фронта волны. Разностные схемы для численного решения приведенного уравнения можно найти, например, в работах [1—3].

Одной из широко распространенных схем является двухслойная неявная разностная схема

$$\frac{E\left(U^{n+1}\right) - E\left(U^{n}\right)}{\tau} = \mathrm{div}\left(\chi\left(U^{n+1}\right)\mathrm{grad}\, U^{n+1}\right).$$

Здесь τ — шаг по времени; n — номер временного слоя. При использовании такой схемы на каждом шаге по времени нередко используется итерационный процесс типа простых итераций:

$$\frac{E\left(U^{\nu+1}\right) - E\left(U^{n}\right)}{\tau} = \mathrm{div}\left(\chi\left(U^{\nu}\right)\mathrm{grad}\, U^{\nu+1}\right), \tag{1}$$

где $U^0 = U^n$, $\nu = 0, 1, \ldots$ — номер итерации внутри шага по времени. Схема безусловно устойчива, но для сходимости итерационного процесса, как было показано, например, в работе [4], необходимо выполнение условия

$$D \leq 4 + 16A. \tag{2}$$

Здесь $D = 4B^2 = 4K_{\alpha\beta}^2$, где $B = K_{\alpha\beta} = \dfrac{q\tau}{\chi h C}\dfrac{\partial\chi}{\partial U}$, $q = -\chi(U)\,\mathrm{grad}\,U$, h — шаг сетки по пространству; $A = K_0 = \dfrac{\tau\chi}{h^2 C}$, $C = \dfrac{\partial E}{\partial U}$. Аналогичное условие было получено Б. П. Тихомировым в 1974 г. (неопубликованная работа). Условие (2) применимо, если выбрано хорошее начальное приближение, близкое к решению. При этом в (2) нет квадратичной зависимости шага по времени от шага сетки по пространству.

Вместо достаточно затратной по машинному времени схемы (1) иногда применяются более "дешевые" схемы. В них расчет поля коэффициентов теплопроводности на шаге по времени проводится не более определенного количества раз, после чего коэффициенты теплопроводности "замораживаются" и выполняются только итерации по нелинейности уравнения состояния, как правило, быстро сходящиеся. Схемы условно устойчивы, но ограничение на шаг по времени является достаточно разумным. Примерами таких схем, нашедших практическое применение в некоторых методиках, являются схема с явным коэффициентом теплопроводности

$$\frac{E\left(U^{n+1}\right) - E\left(U^n\right)}{\tau} = \mathrm{div}\left(\chi\left(U^n\right)\mathrm{grad}\,U^{n+1}\right), \tag{3}$$

необходимое условие устойчивости которой имеет вид [4]

$$D \le 8A, \tag{4}$$

и схема с однократным пересчетом коэффициентов теплопроводности

$$\begin{aligned} \frac{E^{n+1/2} - E^n}{\tau} &= \mathrm{div}\left(\chi\left(U^n\right)\mathrm{grad}\,U^{n+1/2}\right); \\ \frac{E^{n+1} - E^n}{\tau} &= \mathrm{div}\left(\chi\left(U^{n+1/2}\right)\mathrm{grad}\,U^{n+1}\right) \end{aligned} \tag{5}$$

с необходимым условием устойчивости [4]

$$D \le 4 + 21{,}072A. \tag{6}$$

В схеме (5) для решения второго уравнения применяется итерационный процесс $\dfrac{E^{\nu+1} - E^n}{\tau} = \mathrm{div}\left(\chi\left(U^{n+1/2}\right)\mathrm{grad}\,U^{\nu+1}\right)$.

Критерии (2), (4), (6) позволяют автоматически вычислять требуемый шаг по времени. В работе [4] отмечается: из вида условий (2) и (4) следует, что при числе итераций больше двух использование итерационного процесса (1) не оправдано с точки зрения затрат машинного времени по сравнению с итерационным процессом (3) ввиду дороговизны итераций по коэффициенту теплопроводности. При этом все указанные выше схемы имеют один и тот же порядок аппроксимации по времени и пространству на гладких решениях при использовании одной и той же аппроксимации операторов дивергенции и градиента. Также в работе [4] в расчетах задач с известным точным решением по методике МЕДУЗА [5, 6] продемонстрировано, что схема (5) с автоматическим вычислением шага по времени по формуле (6) является экономичнее схемы с неявным коэффициентом теплопроводности (1), практически не уступая ей по точности. Расчеты по схеме (5) с различными значениями навязанного шага по времени и с шагом, определяемым из условия (6), показали, что критерий (6) обеспечивает автоматический выбор такого шага по времени, дальнейшее уменьшение которого слабо меняет погрешность расчета задач из [4]. Счет без использования механизмов корректировки шага по времени (2), (4), (6) опасен и может привести к погрешности в расчетах, иногда довольно трудно обнаруживаемой [4].

Исходя из результатов, приведенных в работе [4], во многих расчетах по методике МЕДУЗА применяется схема (5) с однократным пересчетом поля коэффициентов теплопроводности с автоматическим выбором шага по времени из условия (6). Тем не менее иногда вместо схемы с однократным пересчетом поля коэффициентов теплопроводности используется схема с их двукратным пересчетом, которую можно записать в виде

$$\begin{aligned}
&\frac{E^{n+1/3}-E^{n}}{\tau}=\operatorname{div}\left(\chi\left(U^{n}\right)\operatorname{grad}U^{n+1/3}\right);\\
&\frac{E^{n+2/3}-E^{n}}{\tau}=\operatorname{div}\left(\chi\left(U^{n+1/3}\right)\operatorname{grad}U^{n+2/3}\right);\\
&\frac{E^{n+1}-E^{n}}{\tau}=\operatorname{div}\left(\chi\left(U^{n+2/3}\right)\operatorname{grad}U^{n+1}\right).
\end{aligned} \tag{7}$$

Для решения третьего уравнения системы применяется итерационный процесс $\dfrac{E^{\nu+1}-E^{n}}{\tau}=$ $=\operatorname{div}\left(\chi\left(U^{n+2/3}\right)\operatorname{grad}U^{\nu+1}\right)$. Анализу устойчивости такой схемы посвящена настоящая работа, являющаяся продолжением [4]. Цель работы — определить практически пригодные критерии автоматического выбора шага по времени.

Анализ устойчивости схемы с двукратным пересчетом поля коэффициентов теплопроводности

Получим необходимое условие устойчивости схемы (7) по начальным данным. Для анализа схемы будем использовать метод Фурье—Неймана.

Линеаризуем схему (7), подставим малые возмущения. Предположим, что теплоемкость C и коэффициент теплопроводности не зависят ни от номера шага по времени, ни от номера ячейки. Тогда система уравнений для малых возмущений в одномерном плоском случае на равномерной сетке с шагом h будет иметь вид

$$\begin{aligned}
&\delta U_{j+1/2}^{n+1/3}-\delta U_{j+1/2}^{n}=\frac{\chi\tau}{h^{2}C}\left(\delta U_{j+3/2}^{n+1/3}-2\delta U_{j+1/2}^{n+1/3}+\delta U_{j-1/2}^{n+1/3}\right)-\frac{q\tau}{2\chi hC}\frac{\partial\chi}{\partial U}\left(\delta U_{j+3/2}^{n}-\delta U_{j-1/2}^{n}\right);\\
&\delta U_{j+1/2}^{n+2/3}-\delta U_{j+1/2}^{n}=\frac{\chi\tau}{h^{2}C}\left(\delta U_{j+3/2}^{n+2/3}-2\delta U_{j+1/2}^{n+2/3}+\delta U_{j-1/2}^{n+2/3}\right)-\frac{q\tau}{2\chi hC}\frac{\partial\chi}{\partial U}\left(\delta U_{j+3/2}^{n+1/3}-\delta U_{j-1/2}^{n+1/3}\right);\\
&\delta U_{j+1/2}^{n+1}-\delta U_{j+1/2}^{n}=\frac{\chi\tau}{h^{2}C}\left(\delta U_{j+3/2}^{n+1}-2\delta U_{j+1/2}^{n+1}+\delta U_{j-1/2}^{n+1}\right)-\frac{q\tau}{2\chi hC}\frac{\partial\chi}{\partial U}\left(\delta U_{j+3/2}^{n+2/3}-\delta U_{j-1/2}^{n+2/3}\right).
\end{aligned} \tag{8}$$

Ищем решение этой системы в виде

$$\begin{aligned}
&\delta U_{j+1/2}^{n}=\delta U_{0}^{n}e^{ij\omega};\quad \delta U_{j-1/2}^{n}=\delta U_{0}^{n}e^{i(j-1)\omega};\quad \delta U_{j+3/2}^{n}=\delta U_{0}^{n}e^{i(j+1)\omega};\\
&\delta U_{j+1/2}^{n+1/3}=\delta U_{0}^{n+1/3}e^{ij\omega};\quad \delta U_{j-1/2}^{n+1/3}=\delta U_{0}^{n+1/3}e^{i(j-1)\omega};\quad \delta U_{j+3/2}^{n+1/3}=\delta U_{0}^{n+1/3}e^{i(j+1)\omega};\\
&\delta U_{j+1/2}^{n+2/3}=\delta U_{0}^{n+2/3}e^{ij\omega};\quad \delta U_{j-1/2}^{n+2/3}=\delta U_{0}^{n+2/3}e^{i(j-1)\omega};\quad \delta U_{j+3/2}^{n+2/3}=\delta U_{0}^{n+2/3}e^{i(j+1)\omega};\\
&\delta U_{j+1/2}^{n+1}=\delta U_{0}^{n+1}e^{ij\omega};\quad \delta U_{j-1/2}^{n+1}=\delta U_{0}^{n+1}e^{i(j-1)\omega};\quad \delta U_{j+3/2}^{n+1}=\delta U_{0}^{n+1}e^{i(j+1)\omega},
\end{aligned}$$

где $-\pi\le\omega\le\pi$. Тогда после подстановки в (8) получаем связь между δU_0^{n+1} и δU_0^{n} в виде

$$\begin{aligned}
&\delta U_{0}^{n+1}=\lambda\delta U_{0}^{n}=(\mathrm{Re}+i\,\mathrm{Im})\,\delta U_{0}^{n},\\
&\mathrm{Re}=\frac{\left[1+2A\left(1-\cos\omega\right)\right]^{2}-\left(B\sin\omega\right)^{2}}{\left[1+2A\left(1-\cos\omega\right)\right]^{3}},\qquad \mathrm{Im}=\frac{B\sin\omega\left\{\left(B\sin\omega\right)^{2}-\left[1+2A\left(1-\cos\omega\right)\right]\right\}}{\left[1+2A\left(1-\cos\omega\right)\right]^{3}},
\end{aligned}$$

где $A=\dfrac{\chi\tau}{h^{2}C}\ge0$; $B=\dfrac{q\tau}{\chi hC}\dfrac{\partial\chi}{\partial U}\ge0$.

Условие устойчивости $|\lambda|^2 \le 1$ после замены переменных $1 - \cos\omega = 2x$ $(0 \le x \le 1)$, $D = 4B^2 > 0$ и некоторых преобразований можно привести к виду

$$D\,(1-x)\left\{D^2\,[x\,(1-x)]^2 - Dx\,(1-x)\,(1+8Ax) - (1+4Ax)^2\right\} - 8A\,(1+2Ax)\,(1+4Ax)^4 \le 0, \quad (9)$$
$$0 \le x \le 1.$$

При $x = 1$ и $x = 0$ это неравенство выполнено для всех $A > 0$ и всех $D > 0$ (проверяется непосредственно подстановкой). Поэтому будем далее исследовать неравенство (9) при $0 < x < 1$.

Перепишем полином (9) в виде

$$D^3\,(1-x)\,[x\,(1-x)]^2 - D^2 x\,(1-x)^2\,(1+8Ax) - D\,(1-x)\,(1+4Ax)^2 - 8A\,(1+2Ax)\,(1+4Ax)^4 \le 0,$$

или

$$\begin{aligned} &f = a_3 D^3 + a_2 D^2 + a_1 D + a_0 \ge 0, \\ &a_3 = -\,(1-x)\,[x\,(1-x)]^2, \quad a_2 = +x\,(1-x)^2\,(1+8Ax)\,, \quad a_1 = +\,(1-x)\,(1+4Ax)^2\,, \\ &a_0 = +8A\,(1+2Ax)\,(1+4Ax)^4\,, \quad 0 < x < 1, \quad A \ge 0, \quad D \ge 0, \end{aligned} \quad (10)$$

т. е. $a_0 \ge 0$; $a_1 > 0$; $a_2 > 0$; $a_3 < 0$.

Исследуем точки экстремума (10) и определим положение его корней. Легко показать (в том числе используя правило перемены знаков Декарта [7]), что полином (10) при $D > 0$ имеет единственный корень D_1 и единственный экстремум в точке $D_2 = \dfrac{1 + 8Ax + 2\sqrt{1 + 10Ax + 28A^2x^2}}{3x\,(1-x)}$, которая является точкой максимума. Таким образом, условие устойчивости схемы принимает вид

$$D = 4B^2 \le D_{\min}\,(A) = \min_{0<x<1;A>0} \{D_1\,(A,x)\}\,.$$

Корень D_1 определялся численно при помощи метода Ньютона. После получения табличной зависимости $D_{\min}\,(A)$ была выведена формула

$$D \le 6{,}472 + 21{,}212A, \quad (11)$$

которая с точностью до 2 % описывает табличную зависимость (для практических расчетов этого достаточно). Неравенство (11) будем называть практическим условием устойчивости схемы. Из полученной формулы решением квадратного уравнения определяется предельно допустимый шаг по времени.

Продемонстрируем вид зависимости предельно допустимого шага по времени τ от h. Пусть $U = \text{const}$, $\chi\,(U) = AU^\alpha = \text{const}$, $A = \text{const}$, $\alpha = \text{const} \ge 1$, $C = \text{const}$, $E(U) = \text{const}$ и $\text{grad}\,U = \text{const}$. Тогда зависимость имеет вид (кроме схемы с явным коэффициентом теплопроводности) $\tau = \dfrac{c_1 + \sqrt{c_1^2 + 4c_2c_0h^2}}{2c_2}$, $c_1 \ge 0$, $c_2 \ge 0$. То есть зависимость шага по времени от шага пространственной сетки в конкретной ячейке сетки не является квадратичной.

Результаты численных экспериментов

Полученная формула (11) была реализована в методике МЕДУЗА [5, 6]. Метод реализации аналогичен приведенному в работе [4]. Чтобы показать, что может дать переход от схемы с однократным пересчетом поля коэффициентов теплопроводности с ограничением на шаг по времени (6) к схеме с его двукратным пересчетом с ограничением на шаг (11), по методике МЕДУЗА были проведены тестовые расчеты задачи "О распространении тепловой волны в трехслойной системе под углом к границам веществ". Постановка и точное решение приведены в работах [8, 9].

Моделируется процесс прогрева изначально холодной системы, состоящей из трех сильно разноплотных веществ, удельная внутренняя энергия и коэффициент теплопроводности которых существенно нелинейным образом зависят от температуры. Численные эксперименты, проведенные на неструктурированной сетке, состоящей из 4 961 ячейки, показали, что при сопоставимых погрешностях расчета на конечный момент времени (относительное отклонение погрешностей численного решения в двух расчетах не превышало 0,05 %, погрешность и точное решение рассчитывались по формулам, приведенным в [9]) и при сопоставимых временах счета (разница не превышала 1,58 %) для достижения конечного момента времени при использовании (6) потребовалось 4 373 шага по времени, а при использовании (11) оказалось достаточным 4 055 шагов. То есть применение схемы с двукратным пересчетом поля коэффициентов теплопроводности оправдано с точки зрения повышения быстродействия в тех случаях, когда есть большие дополнительные затраты на шаге по времени, например при расчете процессов газовой динамики, теплопроводности и др. При этом время счета одной итерации по нелинейности коэффициента теплопроводности не должно быть значительным, поскольку число итераций при использовании схемы с двукратным пересчетом поля коэффициентов теплопроводности немного увеличивается по сравнению со схемой с однократным пересчетом поля коэффициентов теплопроводности.

Заключение

Исследована на устойчивость по начальным данным разностная схема с двукратным пересчетом поля коэффициентов теплопроводности, применяемая для численного решения уравнения теплопроводности. Показано, что схема условно устойчива. Из необходимого условия устойчивости выведено ограничение на шаг по времени, пригодное для проведения практических расчетов.

Список литературы

1. *Самарский А. А., Соболь И. М.* Примеры численного расчета тепловых волн // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1963. Т. 3, № 4. С. 702—719.
2. *Самарский А. А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.
3. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. Изд. 3-е, исправленное. М.: Наука, 1989.
4. *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.
5. *Глаголева Ю. П., Жогов Б. М., Кирьянов Ю. Ф. и др.* Основы методики МЕДУЗА численного расчета двумерных нестационарных задач газодинамики // Числ. методы мех. сплош. среды. 1972. Т. 3, № 2. С. 18—55.
6. *Горбунов А. А.* Метод решения уравнения теплопроводности на нерегулярных сетках в параллельном режиме в методике МЕДУЗА // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2008. Вып. 3. С. 32—46.
7. *Бронштейн И. Н., Семендяев К. А.* Справочник по математике. М.: Наука, 1986.
8. *Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Горев В. В. и др.* Описание набора тестов для методик и программ, предназначенных для решения двумерных задач теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1992. Вып. 2. С. 14—20.
9. *Авдошина Е. В., Бондаренко Ю. А., Горбунов А. А. и др.* Исследование точности различных методов усреднения коэффициента теплопроводности на стороне ячейки интегрирования при численном решении уравнения теплопроводности // Там же. 2014. Вып. 3. С. 32—46.

Статья поступила в редакцию 29.01.16.

PRACTICAL STABILITY CONDITIONS FOR A DIFFERENCE SCHEME FOR SOLVING THE HEAT TRANSFER EQUATION WITH DOUBLE THERMAL CONDUCTIVITY REMAPPING / Yu. A. Bondarenko, A. A. Gorbunov, B. P. Tikhomirov (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod region).

The von Neumann—Fourier method combined with the Newton numerical method was employed to obtain a practically suitable time step constraint for a conditionally stable scheme with double remapping of the field of thermal conductivities used for numerical solution of the heat transfer equation. It is shown that the dependence of the time step on the mesh spacing is not quadratic.

Keywords: radiant heat transfer, implicit difference scheme, thermal conductivity, initial data stability, von Neumann—Fourier method, iterative Newton method, time step, test simulations.