

УДК 519.6

РАЗНОСТНАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ЛУЧИСТОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ШЕСТИГРАННЫХ ЯЧЕЙКАХ СЕТКИ С ЛИНЕЙЧАТЫМИ ГРАНЯМИ

А. М. Стенин

(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлена разностная схема решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности на структурированной сетке, состоящей из произвольных шестигранных ячеек с линейчатыми гранями. Последовательно придерживаясь изначально принятого соглашения о линейчатости граней ячейки, получены формулы для объема ячейки и вектора нормали в центре ее грани. Дается определение площади грани, через которую ячейка сетки обменивается теплом с соседними ячейками, основанное на понятии векторной, или ориентированной, площади линейчатой поверхности в трехмерном пространстве. Описан алгоритм вычисления тепловых потоков на гранях ячеек сетки. Получена линеаризованная система разностных уравнений для итерационного решения нелинейных уравнений теплового баланса.

Ключевые слова: трехмерное уравнение лучистой теплопроводности, шестигранные ячейки сетки, линейчатые грани, нормаль к линейчатой грани, площадь грани, тепловые потоки на гранях ячеек.

Введение

Построение наиболее экономичного численного метода решения трехмерного уравнения теплопроводности связано с разностными схемами расщепления по пространственным направлениям [1]. При этом характеристики точности и экономичности расчетов зависят от выбора трех направлений расщепления на пространственной сетке и от принятой аппроксимации уравнения теплопроводности на этих направлениях.

Для разностных схем расщепления предпочтительно использовать ортогональную структурированную сетку, состоящую из прямоугольных параллелепипедов $\Omega_{k,i,l}$. Пусть первое направление расщепления составляет ряд ячеек с изменяющимся первым индексом: $\Omega_{k,i,l}$, $k = 1, 2, \dots, N_k - 1$ (направление *вдоль строк*), второе направление расщепления — с изменяющимся вторым индексом: $\Omega_{k,i,l}$, $i = 1, 2, \dots, N_i - 1$ (направление *вдоль столбцов*), третье направление — с изменяющимся третьим индексом: $\Omega_{k,i,l}$, $l = 1, 2, \dots, N_l - 1$ (направление *вдоль листов*). При аппроксимации трехмерного уравнения теплопроводности в каждом из этих направлений записывается *одномерная* система линейных разностных уравнений с трехдиагональной матрицей, которая может быть решена методом прогонки [2]. На равномерных в каждом из направлений расщепления сетках эти уравнения аппроксимируют одномерные линейные уравнения теплопроводности со вторым порядком точности по пространству.

Такого типа численный метод для решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности на прямоугольных структурированных сетках, основанный на разностной схеме расщепления, был реализован в методике ЛЭГАК [3]. Он хорошо зарекомендовал себя в решении многих, в том числе сложных, задач, представляющих практический интерес.

Однако существуют классы задач, результаты расчетов которых на прямоугольной пространственной сетке могут оказаться неудовлетворительными по точности или затратам времени на расчет. К ним относятся задачи, решение которых во многом определяется процессами лучистой (нелинейной) теплопроводности. Для адекватного описания их решения в окрестности фронта тепловой волны требуется весьма подробная пространственная сетка, ориентированная в направлении распространения волны. Попытка обеспечить нужные размеры кубических ячеек эйлеровой сетки приводит к неоправданно большому количеству ячеек во всей задаче. При этом сетка будет излишне подробной и в областях гладкого решения, где это не требуется. Количество ячеек можно существенно уменьшить без потери точности, если выбирать нужную степень подробности сетки в зависимости от локальных особенностей решения задачи, что невозможно на прямоугольных сетках. Такого типа расчеты можно проводить на подвижной лагранжево-эйлеровой сетке или эйлеровой неподвижной сетке с непрямоугольными шестигранными ячейками.

Таким образом, задача создания достаточно точного и экономичного по временным затратам численного метода решения трехмерного уравнения теплопроводности, возможности которого не ограничиваются прямоугольными сетками, является актуальной.

Работа по созданию таких численных методов решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности давно и успешно ведется многими авторами. Не претендуя на полноту списка, отметим только некоторые работы, выполненные в РФЯЦ-ВНИИЭФ.

В 2004 году в методике САТУРН [4] была программно реализована разностная схема для решения трехмерного уравнения теплопроводности, являющаяся обобщением на трехмерный случай разностной схемы [5], названной авторами интерполяционно-инвариантной, с заданием значений температуры в узлах пространственной сетки.

В работе [6] изложена методика построения неявных разностных схем для решения трехмерного уравнения теплопроводности на неструктурированных сетках, основанная на дифференциально-проеекционном методе.

Краткое описание разностной аппроксимации трехмерного уравнения теплопроводности на структурированных пространственных сетках методики МИМОЗА дается в работе [7].

В данной работе представлена разностная схема решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности на структурированной непрямоугольной сетке, состоящей из произвольных шестигранников с линейчатými гранями. Последовательно придерживаясь изначально принятого соглашения о линейчатости граней ячейки, получены формулы для объема ячейки и вектора нормали в центре ее грани. Дается определение площади грани, через которую ячейка обменивается теплом, основанное на понятии векторной, или ориентированной, площади линейчатой поверхности в трехмерном пространстве.

Получена линеаризованная система разностных уравнений для итерационного решения нелинейных уравнений теплового баланса. Описан алгоритм вычисления тепловых потоков на гранях ячеек сетки. Приведены формулы, выражающие коэффициенты при искомым значениях температуры в ячейках сетки через коэффициенты при температурах в формулах для потоков. Кратко представлен алгоритм вычисления коэффициентов в формулах для потоков.

Постановка задачи. Дискретизация

Дифференциальное уравнение, описывающее теплопроводность вещества, содержащегося в трехмерной пространственной области O , ограниченной поверхностью Γ , можно записать в виде

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \operatorname{div} (\chi \operatorname{grad} T), \quad (1)$$

где t — физическое время в задаче; ρ — плотность вещества; E — удельная внутренняя энергия единицы массы вещества; T — температура. Предполагается, что коэффициент теплопроводности $\chi = \chi(\rho, T)$ зависит от температуры, т. е. уравнение (1) является уравнением лучистой теплопроводности [8]. Функции E и T связаны взаимно обратимыми соотношениями $E = E(\rho, T)$ и

$T = T(\rho, E)$ — уравнением состояния, в общем случае нелинейным. Радиусы-векторы точек пространства $\vec{R} = (x, y, z)$ задаются в прямоугольной декартовой системе координат XYZ .

В начальный момент времени $t = t_0$ задано пространственное распределение температуры $T(x, y, z, t_0) = T^0(x, y, z)$.

На границе Γ рассматриваемой области O задано граничное условие одного из следующих трех типов:

1) граничная температура

$$T(\Gamma, t) = T_\Gamma(t); \quad (2)$$

2) граничный поток тепла

$$\chi \frac{\partial T}{\partial N} \Big|_\Gamma = Q_\Gamma(t), \quad (3)$$

где $\frac{\partial T}{\partial N} \Big|_\Gamma$ — производная температуры вдоль внешней нормали к границе области;

3) поток излучения на свободной поверхности

$$Q_\Gamma = \Phi(T), \quad (4)$$

где $\Phi(T) = -0,25\sigma cT^4$, σ — постоянная Стефана—Больцмана, c — скорость света.

Уравнение лучистой теплопроводности (1) может быть записано в виде следующего закона сохранения энергии в элементарном объеме V , ограниченном поверхностью S :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho E dv = \int_S \chi (\text{grad } T \cdot \vec{N}) ds = \int_S \chi \frac{\partial T}{\partial N} ds, \quad (5)$$

где $\frac{\partial T}{\partial N}$ — производная температуры по направлению внешней нормали к поверхности S .

Аппроксимация уравнения теплопроводности строится на структурированной сетке с шестигранными ячейками, не обязательно прямоугольными. Предполагается, что совокупность внешних граней приграничных ячеек сетки достаточно хорошо аппроксимирует границу Γ области O , а объединение ячеек заполняет область O без зазоров и перекрытий.

На рис. 1 показана ячейка сетки $\Omega_{k,i,l}$, $k = 1, 2, \dots, N_k - 1$, $i = 1, 2, \dots, N_i - 1$, $l = 1, 2, \dots, N_l - 1$, с глобальной нумерацией ее вершин тройными нижними индексами, $\vec{R}_{k,i,l} = (x_{k,i,l}, y_{k,i,l}, z_{k,i,l})$, $k = 1, 2, \dots, N_k$, $i = 1, 2, \dots, N_i$, $l = 1, 2, \dots, N_l$, и с их локальной нумерацией относительно данной ячейки $\Omega_{k,i,l}$: $\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_8$.

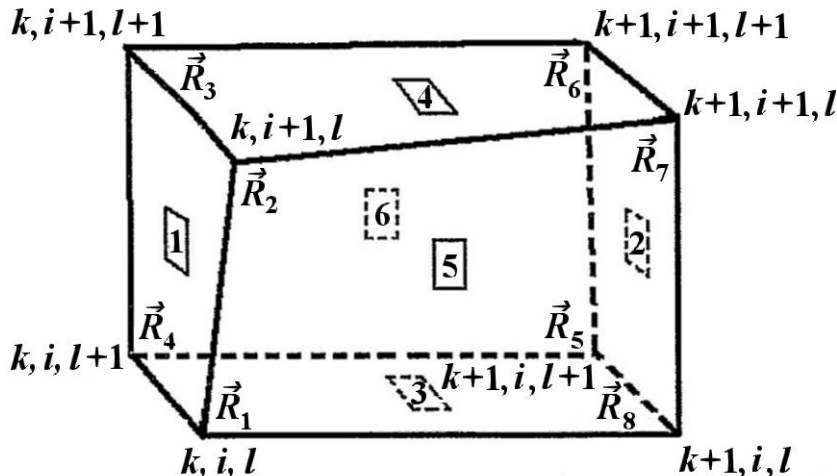


Рис. 1. Ячейка сетки $\Omega_{k,i,l}$ с локальной нумерацией вершин и граней

При построении разностной схемы предполагается, что значения энергии, плотности и температуры определены в ячейках сетки. Они обозначаются теми же нижними индексами, что и сама ячейка сетки, в которой эти величины определены: $E_{k,i,l}$, $\rho_{k,i,l}$, $T_{k,i,l}$.

Верхний индекс n ($n+1$) при значениях величин, зависящих от времени, будет указывать момент времени $t = t^n$ ($t = t^{n+1}$), на который определена соответствующая величина, например, $E^n = E(t^n)$, $T^n = T(t^n)$; n ($n+1$) — номер шага по времени. Через $\tau^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n$ обозначается значение шага по времени.

Локальные номера граней ячейки $\Gamma\gamma$, $\gamma = \overline{1, 6}$, на рис. 1 заключены в прямоугольники. Каждая грань является линейчатой поверхностью, натянутой на соответствующие четыре вершины [9, 10]. Параметрическое уравнение, например, грани $\Gamma 1$ ($\vec{R}_1 \vec{R}_2 \vec{R}_3 \vec{R}_4$ на рис. 1) можно записать в виде

$$\vec{R} = 0,25 \left(\vec{R}_a + \vec{R}_b \alpha + \vec{R}_c \beta + \vec{R}_d \alpha \beta \right), \quad -1 \leq \alpha \leq 1, \quad -1 \leq \beta \leq 1, \quad (6)$$

где $\vec{R}_a = \vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \vec{R}_3 + \vec{R}_4$; $\vec{R}_b = -\vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \vec{R}_3 - \vec{R}_4$; $\vec{R}_c = -\vec{R}_1 - \vec{R}_2 + \vec{R}_3 + \vec{R}_4$; $\vec{R}_d = \vec{R}_1 - \vec{R}_2 + \vec{R}_3 - \vec{R}_4$;

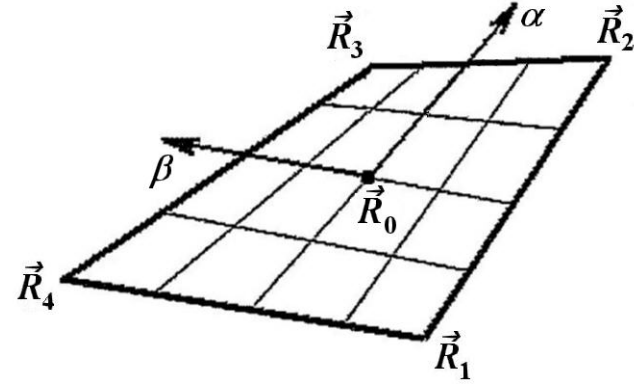


Рис. 2. Грань $\Gamma 1$ ячейки сетки $\Omega_{k,i,l}$

направления возрастания параметров α и β показаны на рис. 2. Аналогичные уравнения имеют место для остальных граней. Заметим, что при значениях $\alpha = 0$, $\beta = 0$ из (6) получаем координаты центральной точки грани $\Gamma 1$ (см. рис. 2):

$$\vec{R}_0 = 0,25 \left(\vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \vec{R}_3 + \vec{R}_4 \right). \quad (7)$$

Очевидно, что все ребра шестигранной ячейки $\Omega_{k,i,l}$, поверхности граней которой задаются уравнениями вида (6), являются прямолинейными.

Для дальнейшего понадобится следующая развернутая запись векторного уравнения (6):

$$x = 0,25 [x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + (-x_1 + x_2 + x_3 - x_4) \alpha + (-x_1 - x_2 + x_3 + x_4) \beta + (x_1 - x_2 + x_3 - x_4) \alpha \beta]; \quad (8)$$

$$y = 0,25 [y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + (-y_1 + y_2 + y_3 - y_4) \alpha + (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4) \beta + (y_1 - y_2 + y_3 - y_4) \alpha \beta]; \quad (9)$$

$$z = 0,25 [z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + (-z_1 + z_2 + z_3 - z_4) \alpha + (-z_1 - z_2 + z_3 + z_4) \beta + (z_1 - z_2 + z_3 - z_4) \alpha \beta]. \quad (10)$$

При задании поверхности параметрическими уравнениями (8)–(10) вида $x = x(\alpha, \beta)$, $y = y(\alpha, \beta)$, $z = z(\alpha, \beta)$ предполагается [11], что не обращаются в нуль одновременно три следующих функциональных определителя:

$$\frac{D(y, z)}{D(\alpha, \beta)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial y}{\partial \alpha} & \frac{\partial z}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial y}{\partial \beta} & \frac{\partial z}{\partial \beta} \end{vmatrix} = \frac{\partial y}{\partial \alpha} \frac{\partial z}{\partial \beta} - \frac{\partial y}{\partial \beta} \frac{\partial z}{\partial \alpha}; \quad (11)$$

$$\frac{D(z, x)}{D(\alpha, \beta)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial z}{\partial \alpha} & \frac{\partial x}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial z}{\partial \beta} & \frac{\partial x}{\partial \beta} \end{vmatrix} = \frac{\partial z}{\partial \alpha} \frac{\partial x}{\partial \beta} - \frac{\partial z}{\partial \beta} \frac{\partial x}{\partial \alpha}; \quad (12)$$

$$\frac{D(x, y)}{D(\alpha, \beta)} = \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial x}{\partial \alpha} & \frac{\partial y}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial x}{\partial \beta} & \frac{\partial y}{\partial \beta} \end{array} \right| = \frac{\partial x}{\partial \alpha} \frac{\partial y}{\partial \beta} - \frac{\partial x}{\partial \beta} \frac{\partial y}{\partial \alpha}. \quad (13)$$

Запишем явные выражения для определителей (11)–(13). Из уравнений (8)–(10) имеем

$$\frac{\partial x}{\partial \alpha} = \frac{1}{4} [-x_1 + x_2 + x_3 - x_4 + (x_1 - x_2 + x_3 - x_4) \beta]; \quad (14)$$

$$\frac{\partial y}{\partial \alpha} = \frac{1}{4} [-y_1 + y_2 + y_3 - y_4 + (y_1 - y_2 + y_3 - y_4) \beta]; \quad (15)$$

$$\frac{\partial z}{\partial \alpha} = \frac{1}{4} [-z_1 + z_2 + z_3 - z_4 + (z_1 - z_2 + z_3 - z_4) \beta]; \quad (16)$$

$$\frac{\partial x}{\partial \beta} = \frac{1}{4} [-x_1 - x_2 + x_3 + x_4 + (x_1 - x_2 + x_3 - x_4) \alpha]; \quad (17)$$

$$\frac{\partial y}{\partial \beta} = \frac{1}{4} [-y_1 - y_2 + y_3 + y_4 + (y_1 - y_2 + y_3 - y_4) \alpha]; \quad (18)$$

$$\frac{\partial z}{\partial \beta} = \frac{1}{4} [-z_1 - z_2 + z_3 + z_4 + (z_1 - z_2 + z_3 - z_4) \alpha]. \quad (19)$$

После несложных, хотя и громоздких, преобразований получим

$$\frac{D(y, z)}{D(\alpha, \beta)} = \frac{1}{4} [S_{1234}^{YZ} + (S_{123}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \alpha + (S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \beta]; \quad (20)$$

$$\frac{D(z, x)}{D(\alpha, \beta)} = \frac{1}{4} [S_{1234}^{ZX} + (S_{123}^{ZX} - S_{124}^{ZX}) \alpha + (S_{134}^{ZX} - S_{124}^{ZX}) \beta]; \quad (21)$$

$$\frac{D(x, y)}{D(\alpha, \beta)} = \frac{1}{4} [S_{1234}^{XY} + (S_{123}^{XY} - S_{124}^{XY}) \alpha + (S_{134}^{XY} - S_{124}^{XY}) \beta]. \quad (22)$$

Здесь S обозначает площадь; верхние индексы YZ , ZX , XY означают проекции пространственной фигуры на координатные плоскости OYZ , OZX , OXY соответственно; нижние индексы указывают локальные номера и порядок следования вершин пространственной фигуры. Так, S_{1234} обозначает площадь пространственного четырехугольника, каковым является грань Γ_1 ячейки $\Omega_{k,i,l}$ (см. рис. 2); S_{123} , S_{124} , S_{134} — площади треугольников, построенных из вершины \vec{R}_1 грани Γ_1 .

Введем обозначения

$$\vec{R}_\alpha = \left(\frac{\partial x}{\partial \alpha}, \frac{\partial y}{\partial \alpha}, \frac{\partial z}{\partial \alpha} \right); \quad \vec{R}_\beta = \left(\frac{\partial x}{\partial \beta}, \frac{\partial y}{\partial \beta}, \frac{\partial z}{\partial \beta} \right). \quad (23)$$

Компоненты векторов (23) определяются формулами (14)–(19). Векторы \vec{R}_α , \vec{R}_β определяют касательную плоскость в любой точке $\vec{R} = \vec{R}(\alpha, \beta)$ грани Γ_1 ячейки $\Omega_{k,i,l}$. Их векторное произведение $\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta$ представляет собой вектор, параллельный нормали, а вектор $\vec{N} = \frac{\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta}{|\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta|}$ есть единич-

ный вектор внешней нормали в точке $\vec{R}(\alpha, \beta)$ грани Γ_1 .

Непосредственной проверкой можно убедиться, что векторное произведение $\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta$ имеет своими компонентами три определителя (11)–(13):

$$\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta = \left(\frac{D(y, z)}{D(\alpha, \beta)}, \frac{D(z, x)}{D(\alpha, \beta)}, \frac{D(x, y)}{D(\alpha, \beta)} \right), \quad (24)$$

которые для грани Γ_1 ячейки $\Omega_{k,i,l}$ (см. рис. 1) вычисляются по формулам (20)–(22). Соответственно единичный вектор нормали \vec{N} имеет следующие составляющие по координатным осям:

$$N_x = \frac{1}{L} \frac{D(y, z)}{D(\alpha, \beta)}; \quad N_y = \frac{1}{L} \frac{D(z, x)}{D(\alpha, \beta)}; \quad N_z = \frac{1}{L} \frac{D(x, y)}{D(\alpha, \beta)}, \quad (25)$$

где

$$L = \sqrt{\left(\frac{D(y, z)}{D(\alpha, \beta)}\right)^2 + \left(\frac{D(z, x)}{D(\alpha, \beta)}\right)^2 + \left(\frac{D(x, y)}{D(\alpha, \beta)}\right)^2}.$$

Очевидно, что если грань ячейки вырождается в отрезок или точку, то все три определителя (20)–(22) на этой грани обращаются в нуль. Ни в одной точке такой "грани" невозможно построить нормаль (25) к ее поверхности, да и поверхности-то нет. Забегая вперед, отметим, что если в задаче допускать наличие таких ячеек с вырожденными гранями, то эти грани нужно обрабатывать особым образом, например, не прибегая к вычислениям, сразу же поток тепла на этой грани положить равным нулю.

Разностный аналог закона сохранения энергии

Разностная схема строится на основе разностного аналога закона сохранения энергии (5). В качестве элементарного объема интегрирования используется пространственная ячейка сетки. Очередную ячейку $\Omega_{k, i, l}$, для которой записан закон сохранения энергии, будем для краткости называть ячейкой консервативности. Разностное уравнение сохранения энергии в ячейке консервативности можно записать в следующем виде:

$$M_{k, i, l} \frac{E_{k, i, l}^{n+1} - E_{k, i, l}^n}{\tau^{n+1/2}} = \sum_{\gamma=1}^6 S_{\gamma} Q_{\gamma}^{n+1}. \quad (26)$$

Здесь $M_{k, i, l} = \rho_{k, i, l} V_{k, i, l}$ — не зависящая от времени масса шестигранной ячейки консервативности объемом $V_{k, i, l}$. Суммирование в правой части уравнения (26) ведется по всем граням Γ_{γ} , $\gamma = \overline{1, 6}$, ячейки $\Omega_{k, i, l}$. Локальная нумерация граней показана на рис. 1.

Объем шестигранной ячейки сетки с линейчатыми гранями может быть вычислен по следующей формуле:

$$V_{k, i, l} = \frac{1}{3} \sum_{\gamma=1}^6 \left(x_0^{(\gamma)} S_{\gamma}^{YZ} + y_0^{(\gamma)} S_{\gamma}^{ZX} + z_0^{(\gamma)} S_{\gamma}^{XY} \right), \quad (27)$$

где $\vec{R}_0^{(\gamma)} = (x_0^{(\gamma)}, y_0^{(\gamma)}, z_0^{(\gamma)}) = 0,25 (\vec{R}_1^{(\gamma)} + \vec{R}_2^{(\gamma)} + \vec{R}_3^{(\gamma)} + \vec{R}_4^{(\gamma)})$ — центральные точки граней Γ_{γ} , $\gamma = \overline{1, 6}$, ячейки $\Omega_{k, i, l}$ (см. рис. 1); S_{γ}^{YZ} , S_{γ}^{ZX} , S_{γ}^{XY} — площади проекций граней Γ_{γ} на координатные плоскости OYZ , OZX , OXY соответственно, которые вычисляются по формулам

$$S_{\gamma}^{YZ} = 0,5 \left[(y_2^{(\gamma)} - y_4^{(\gamma)}) (z_3^{(\gamma)} - z_1^{(\gamma)}) - (y_3^{(\gamma)} - y_1^{(\gamma)}) (z_2^{(\gamma)} - z_4^{(\gamma)}) \right]; \quad (28)$$

$$S_{\gamma}^{ZX} = 0,5 \left[(z_2^{(\gamma)} - z_4^{(\gamma)}) (x_3^{(\gamma)} - x_1^{(\gamma)}) - (z_3^{(\gamma)} - z_1^{(\gamma)}) (x_2^{(\gamma)} - x_4^{(\gamma)}) \right]; \quad (29)$$

$$S_{\gamma}^{XY} = 0,5 \left[(x_2^{(\gamma)} - x_4^{(\gamma)}) (y_3^{(\gamma)} - y_1^{(\gamma)}) - (x_3^{(\gamma)} - x_1^{(\gamma)}) (y_2^{(\gamma)} - y_4^{(\gamma)}) \right]. \quad (30)$$

При их вычислении на каждой грани используется своя локальная нумерация вершин $\vec{R}_m^{(\gamma)}$, $m = \overline{1, 4}$, направленная против часовой стрелки для наблюдателя, расположенного на внешней стороне грани.

Формула (27) точно выражает объем шестигранника с линейчатыми гранями через координаты его вершин и привлекает своей простотой. Подробный вывод формулы содержится в работах [7, 8].

Величины

$$Q_{\gamma}^{n+1} = \chi_{0\gamma}^{n+1} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial N^{(\gamma)}} \right)^{n+1} \quad (31)$$

в разностном уравнении теплового баланса (26) аппроксимируют потоки тепла через единицу площади за единицу времени на гранях ячейки консервативности. Верхний индекс $n+1$ здесь указывает на то, что все значения температуры T при вычислении потоков берутся с верхнего слоя по времени $t = t^{n+1}$, т. е. схема является неявной.

$\chi_{0\gamma}$ в формуле (31) обозначают коэффициенты теплопроводности, определенные на гранях $\Gamma\gamma$, $\gamma = \overline{1,6}$, ячейки $\Omega_{k,i,l}$ (см. рис. 1). Значение коэффициента теплопроводности не определяется непосредственно на гранях ячейки, но получается усреднением значений в данной ячейке $\Omega \equiv \Omega_{k,i,l}$ и в соседних ячейках сетки, имеющих общую грань с ячейкой $\Omega_{k,i,l}$. Известно несколько наиболее распространенных способов такого усреднения коэффициентов теплопроводности, которые здесь не рассматриваются. Исследованию их влияния на точность расчетов посвящена, например, работа [12], где приводятся ссылки на другие работы.

Запись $\frac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}}$ в формуле (31) обозначает производную температуры по направлению нормали, проведенной из центральной точки грани $\Gamma\gamma$ с номером $\gamma = \overline{1,6}$. Для вычисления этой производной нужно определить единичный вектор внешней нормали в центральной точке грани $\Gamma\gamma$. Компоненты единичного вектора нормали в любой точке грани $\Gamma\gamma$ определяются формулами (25). Для нормали в центральной точке (см. рис. 3) все производные в этих формулах нужно взять при $\alpha = 0, \beta = 0$. Тогда с учетом (20)–(22) для любой из граней $\Gamma\gamma$ ячейки $\Omega_{k,i,l}$ получим

$$N_x^{(\gamma)} = \frac{S_\gamma^{YZ}}{L_\gamma}; \quad N_y^{(\gamma)} = \frac{S_\gamma^{ZX}}{L_\gamma}; \quad N_z^{(\gamma)} = \frac{S_\gamma^{XY}}{L_\gamma}, \quad (32)$$

где $L_\gamma = \sqrt{(S_\gamma^{YZ})^2 + (S_\gamma^{ZX})^2 + (S_\gamma^{XY})^2}$; S_γ^{YZ} , S_γ^{ZX} , S_γ^{XY} — площади проекций граней $\Gamma\gamma$, вычисляемые по формулам (28)–(30).

S_γ , $\gamma = \overline{1,6}$, в правой части уравнения (26) обозначают площади граней ячейки $\Omega_{k,i,l}$, через которые происходит обмен теплом между ячейкой консервативности и соседними ячейками сетки, обусловленный интегральными тепловыми потоками

$$S_\gamma Q_\gamma^{n+1} = \chi_{0\gamma}^{n+1} S_\gamma \left(\frac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}} \right)^{n+1}. \quad (33)$$

Для пространственной поверхности, заданной параметрическим векторным уравнением (6) или, что то же самое, уравнениями (8)–(10), определяются скалярный и векторный элементы площади [9]:

$$dS = \sqrt{s(\alpha, \beta)} d\alpha d\beta; \quad (34)$$

$$d\vec{S} = \left(\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta \right) d\alpha d\beta = \vec{N} dS, \quad (35)$$

где

$$s(\alpha, \beta) = \left| \vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta \right|^2 = \left(\frac{D(y, z)}{D(\alpha, \beta)} \right)^2 + \left(\frac{D(z, x)}{D(\alpha, \beta)} \right)^2 + \left(\frac{D(x, y)}{D(\alpha, \beta)} \right)^2. \quad (36)$$

Для определения векторной (или ориентированной) площади $\vec{S}^{(\gamma)}$ грани $\Gamma\gamma$ ячейки консервативности $\Omega_{k,i,l}$ нужно вычислить интеграл от векторного элемента площади (35):

$$\vec{S}^{(\gamma)} = \iint_{\Gamma\gamma} \left(\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta \right) d\alpha d\beta. \quad (37)$$

Сначала рассмотрим грань $\Gamma 1$ ячейки $\Omega_{k,i,l}$ (см. рис. 1). Учитывая компоненты вектора $\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta$ (24) и их выражения на грани $\Gamma 1$ (20)–(22), из (37) вычислим координаты вектора ориентированной площади $\vec{S}^{(1)} = \left(S_x^{(1)}, S_y^{(1)}, S_z^{(1)} \right)$:

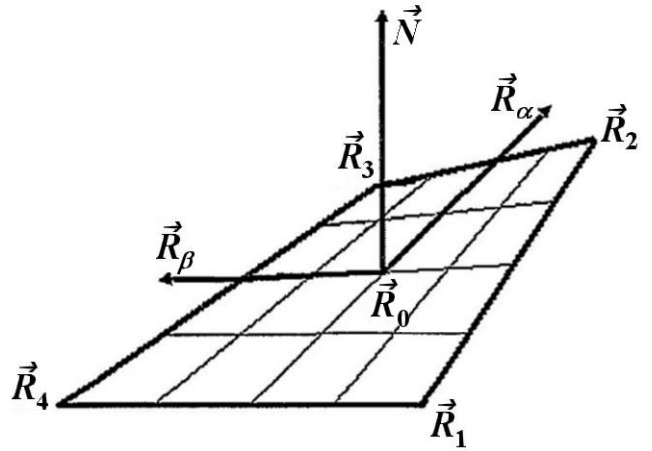


Рис. 3. Вектор нормали в центральной точке грани

$$\begin{aligned}
S_x^{(1)} &= \iint_{\Gamma_1} \frac{D(y, z)}{D(\alpha, \beta)} d\alpha d\beta = \frac{1}{4} \iint_{\Gamma_1} [S_{1234}^{YZ} + (S_{123}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \alpha + (S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \beta] d\alpha d\beta = \\
&= \frac{1}{4} \int_{-1}^1 d\beta \int_{-1}^1 [S_{1234}^{YZ} + (S_{123}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \alpha + (S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \beta] d\alpha = \\
&= \frac{1}{4} \int_{-1}^1 d\beta \left[S_{1234}^{YZ} \alpha + (S_{123}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \frac{\alpha^2}{2} + (S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \beta \alpha \right] \Big|_{-1}^1 = \\
&= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 [S_{1234}^{YZ} + (S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \beta] d\beta = \frac{1}{2} \left[S_{1234}^{YZ} \beta + (S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}) \frac{\beta^2}{2} \right] \Big|_{-1}^1 = S_{1234}^{YZ}. \quad (38)
\end{aligned}$$

Аналогично вычисляются оставшиеся две компоненты вектора $\vec{S}^{(1)}$:

$$S_y^{(1)} = \iint_{\Gamma_1} \frac{D(z, x)}{D(\alpha, \beta)} d\alpha d\beta = S_{1234}^{ZX}; \quad S_z^{(1)} = \iint_{\Gamma_1} \frac{D(x, y)}{D(\alpha, \beta)} d\alpha d\beta = S_{1234}^{XY}. \quad (39)$$

Заметим, что если на каждой грани Γ_γ , $\gamma = \overline{1, 6}$, ячейки консервативности $\Omega_{k, i, l}$ (см. рис. 1) использовать локальную нумерацию вершин грани $\vec{R}_m^{(\gamma)}$, $m = \overline{1, 4}$, по направлению против часовой стрелки для наблюдателя, расположенного на внешней стороне грани, то формулы (38), (39) справедливы для любой грани Γ_γ , а не только для грани Γ_1 .

Таким образом, векторная площадь $\vec{S}^{(\gamma)} = (S_x^{(\gamma)}, S_y^{(\gamma)}, S_z^{(\gamma)})$ любой из граней Γ_γ имеет следующие составляющие вдоль осей координат:

$$S_x^{(\gamma)} = S_{1234}^{YZ} \equiv S_\gamma^{YZ}; \quad S_y^{(\gamma)} = S_{1234}^{ZX} \equiv S_\gamma^{ZX}; \quad S_z^{(\gamma)} = S_{1234}^{XY} \equiv S_\gamma^{XY}. \quad (40)$$

При вычислении интегрального потока тепла (33) предполагается, что направление потока на всей грани ячейки сетки определяется нормалью в центре грани и что оно везде одно и то же. Поэтому в качестве скалярной площади грани S_γ в формуле (33), через которую происходит обмен теплом между ячейкой консервативности $\Omega_{k, i, l}$ и соседними ячейками сетки, берется проекция векторной площади (40) на вектор нормали (32) в центральной точке грани:

$$S_\gamma = N_x^{(\gamma)} S_x^{(\gamma)} + N_y^{(\gamma)} S_y^{(\gamma)} + N_z^{(\gamma)} S_z^{(\gamma)}.$$

Учитывая компоненты вектора нормали (32), получим

$$S_\gamma = \sqrt{(S_\gamma^{YZ})^2 + (S_\gamma^{ZX})^2 + (S_\gamma^{XY})^2}. \quad (41)$$

Вычислить точное значение скалярной площади грани путем интегрирования элемента площади (34) весьма затруднительно, так как интеграл

$$\tilde{S}_\gamma = \iint_{\Gamma_\gamma} \sqrt{s(\alpha, \beta)} d\alpha d\beta \quad (42)$$

не выражается в элементарных функциях. Пользуясь теоремой о среднем, вычислим приближенное значение \tilde{S}_γ интеграла (42). Среднее по области интегрирования $-1 \leq \alpha \leq 1$, $-1 \leq \beta \leq 1$ значение подынтегральной функции получается при значениях $\alpha = 0$, $\beta = 0$. В соответствии с (36) с учетом (20)–(22) получим

$$\sqrt{s(\alpha = 0, \beta = 0)} = \frac{1}{4} \sqrt{(S_\gamma^{YZ})^2 + (S_\gamma^{ZX})^2 + (S_\gamma^{XY})^2}.$$

Интеграл $\iint_{\Gamma_\gamma} d\alpha d\beta$ по грани интегрирования равен $\iint_{\Gamma_\gamma} d\alpha d\beta = \int_{-1}^1 d\beta \int_{-1}^1 d\alpha = 4$. То есть интеграл (42) приблизительно равен

$$\tilde{S}_\gamma = \sqrt{(S_\gamma^{YZ})^2 + (S_\gamma^{ZX})^2 + (S_\gamma^{XY})^2}. \quad (43)$$

Таким образом, скалярная площадь грани (41), основанная на понятии векторной (или ориентированной) площади линейчатой поверхности в трехмерном пространстве, совпадает со скалярной площадью (43), полученной приближенным интегрированием элемента скалярной площади линейчатой поверхности, что подтверждает согласованность выбора скалярной площади $S_\gamma = \tilde{S}_\gamma$ грани ячейки в формуле (33) для интегрального потока.

Представленная разностная схема строится на трехмерной непрямоугольной структурированной шестигранной сетке. Для аппроксимации производных температуры $\frac{\partial T}{\partial N(\gamma)}$ вдоль внешней нормали к граням ячейки $\Omega_{k,i,l}$ на такой сетке приходится использовать сеточный шаблон, состоящий из 27 ячеек. На рис. 4–6 схематично показаны три слоя ячеек шаблона, по 9 ячеек в каждом слое, разбитых в направлениях по строкам, столбцам и листам.

Для сокращения записи при описании схемы вводится локальная нумерация ячеек сетки и значений сеточных функций в этих ячейках.

В кружках на рис. 4–6 приведена локальная нумерация $\Omega 1$ – $\Omega 26$ соседних ячеек сетки относительно рассматриваемой ячейки консервативности $\Omega_{k,i,l}$. Самой ячейке $\Omega_{k,i,l}$ присваивается номер 0, т. е. $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,i,l}$. Локальные номера шести ячеек, соседних с ячейкой $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,i,l}$ по ее граням, определяются локальными номерами (см. рис. 1) этих граней. То есть

$$\begin{aligned} \Omega 1 &\equiv \Omega_{k-1,i,l}; & \Omega 2 &\equiv \Omega_{k+1,i,l}; & \Omega 3 &\equiv \Omega_{k,i-1,l}; \\ \Omega 4 &\equiv \Omega_{k,i+1,l}; & \Omega 5 &\equiv \Omega_{k,i,l-1}; & \Omega 6 &\equiv \Omega_{k,i,l+1}. \end{aligned} \quad (44)$$

Далее, номера $\Omega 7$ – $\Omega 10$ используются для ячеек, соседних с ячейкой $\Omega 1 \equiv \Omega_{k-1,i,l}$ (см. рис. 4) по ее граням с номерами Г3, Г4, Г5, Г6 (см. рис. 1), так что

$$\Omega 7 \equiv \Omega_{k-1,i-1,l}; \quad \Omega 8 \equiv \Omega_{k-1,i+1,l}; \quad \Omega 9 \equiv \Omega_{k-1,i,l-1}; \quad \Omega 10 \equiv \Omega_{k-1,i,l+1}. \quad (45)$$

Номера $\Omega 11$ – $\Omega 14$ присваиваются ячейкам, соседним с ячейкой $\Omega 2 \equiv \Omega_{k+1,i,l}$ (см. рис. 4) также по ее граням с номерами Г3, Г4, Г5, Г6 (см. рис. 1):

$$\Omega 11 \equiv \Omega_{k+1,i-1,l}; \quad \Omega 12 \equiv \Omega_{k+1,i+1,l}; \quad \Omega 13 \equiv \Omega_{k+1,i,l-1}; \quad \Omega 14 \equiv \Omega_{k+1,i,l+1}. \quad (46)$$

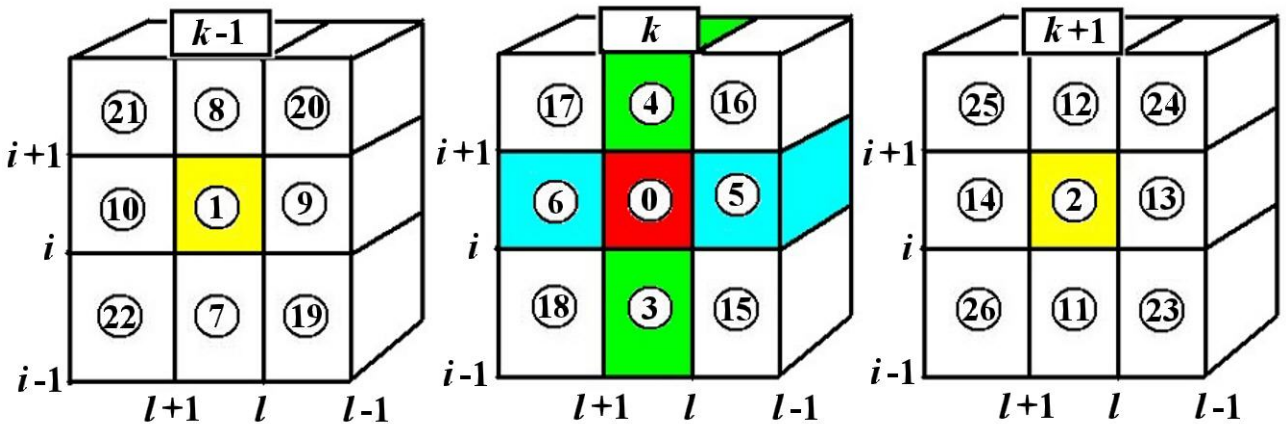


Рис. 4. Слои ячеек шаблона по строкам

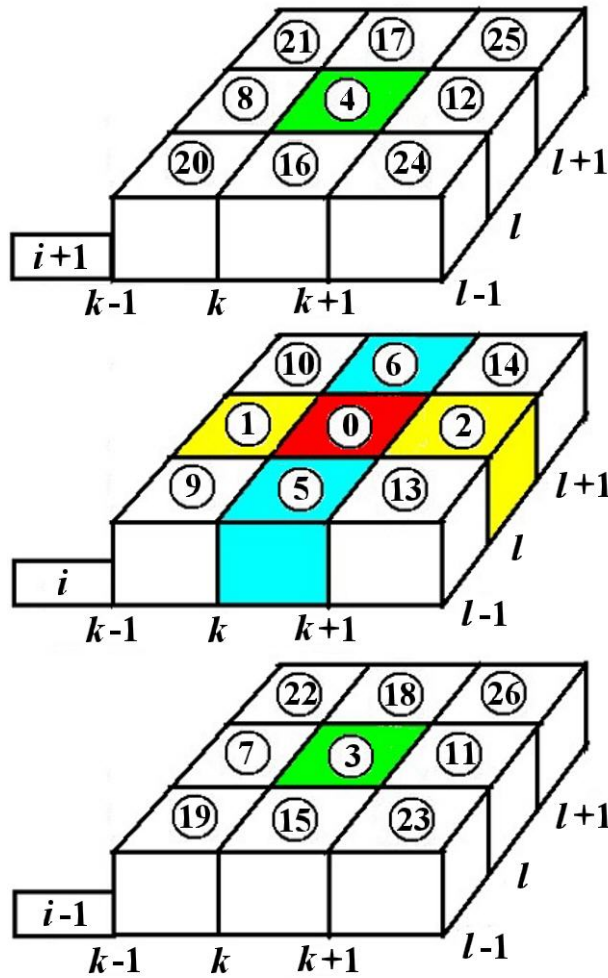


Рис. 5. Слои ячеек шаблона по столбцам

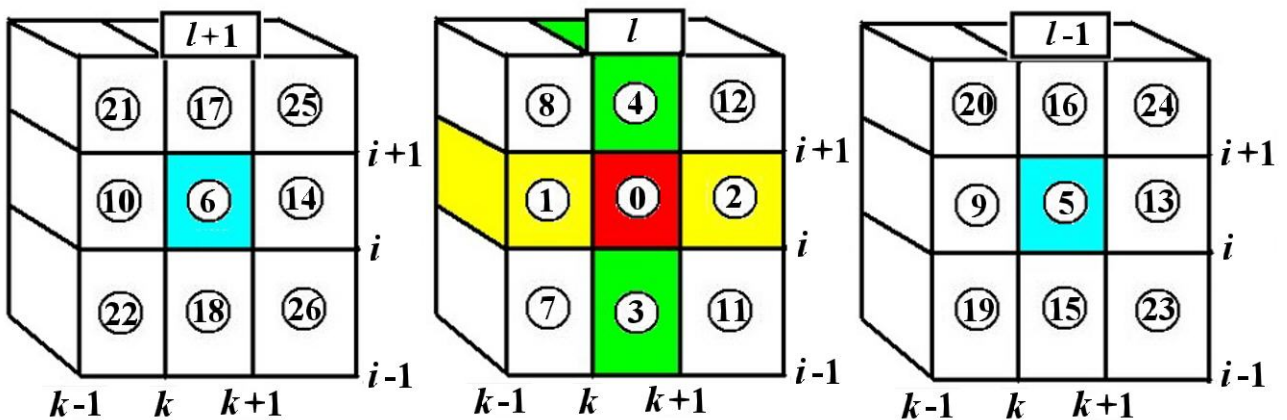


Рис. 6. Слои ячеек шаблона по листам

Ячейки с номерами Ω_{15} — Ω_{18} расположены на слое ячеек, отвечающих первому индексу k (см. рис. 4). Все они имеют единственное общее ребро с ячейкой $\Omega_0 \equiv \Omega_{k,i,l}$, т. е. в некотором смысле расположены по диагоналям к ячейке $\Omega_{k,i,l}$. Нумерация начинается с ребра $\vec{R}_1\vec{R}_8$ ячейки $\Omega_{k,i,l}$ (см. рис. 1) и далее следует обходу ребер в порядке $\vec{R}_2\vec{R}_7, \vec{R}_3\vec{R}_6, \vec{R}_4\vec{R}_5$. Таким образом:

$$\Omega_{15} \equiv \Omega_{k,i-1,l-1}; \quad \Omega_{16} \equiv \Omega_{k,i+1,l-1}; \quad \Omega_{17} \equiv \Omega_{k,i+1,l+1}; \quad \Omega_{18} \equiv \Omega_{k,i-1,l+1}. \quad (47)$$

Аналогично нумеруются четыре ячейки, *диагональные* по отношению к $\Omega_{k-1,i,l}$, которые расположены на слое, отвечающем первому индексу $k-1$ (см. рис. 4):

$$\Omega_{19} \equiv \Omega_{k-1,i-1,l-1}; \quad \Omega_{20} \equiv \Omega_{k-1,i+1,l-1}; \quad \Omega_{21} \equiv \Omega_{k-1,i+1,l+1}; \quad \Omega_{22} \equiv \Omega_{k-1,i-1,l+1}. \quad (48)$$

Наконец, для ячеек, расположенных по диагоналям к ячейке $\Omega_{k+1,i,l}$ (см. рис. 4), вводится следующая нумерация:

$$\Omega_{23} \equiv \Omega_{k+1,i-1,l-1}; \quad \Omega_{24} \equiv \Omega_{k+1,i+1,l-1}; \quad \Omega_{25} \equiv \Omega_{k+1,i+1,l+1}; \quad \Omega_{26} \equiv \Omega_{k+1,i-1,l+1}. \quad (49)$$

Разностная производная температуры по нормали

Для вычисления разностной производной температуры по направлению нормали $\frac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}}$, фигурирующей в определении теплового потока (33) на грани Γ_γ , $\gamma = \overline{1,6}$, ячейки $\Omega_0 \equiv \Omega_{k,i,l}$, здесь используется обобщение на трехмерный случай алгоритма, который был реализован в программе для решения двумерного уравнения теплопроводности еще в методике СИГМА [13]. Этот подход позволяет избежать, например, неприятного *шахматного эффекта* [14] в численном решении задачи на квадратных и кубических сетках, когда значения температуры в соседних ячейках, расположенных в шахматном порядке, очень сильно колеблются от точки к точке даже в задачах с гладкими аналитическими решениями. Проявление такого эффекта возможно, когда для аппроксимации потоков на гранях ячеек сетки используется разностный градиент температуры из (5), аналогичный градиенту давления в некоторых разностных схемах газовой динамики.

Рассмотрим некоторую ячейку консервативности $\Omega_0 \equiv \Omega_{k,i,l}$, на грани которой, например Γ_1 с вершинами R_1, R_2, R_3, R_4 , нужно найти разностную производную $\frac{\partial T}{\partial N^{(1)}}$ по нормали $\vec{N}^{(1)}$ (32), проведенной из центральной точки $G_1 \equiv R_{G_1} \equiv R_0$ (7) этой грани в сторону соседней ячейки $\Omega_1 \equiv \Omega_{k-1,i,l}$ (см. рис. 1), схематично представленной на рис. 7. Для удобства записи здесь и далее $R_m \equiv \vec{R}_m$, $m = 0, 1, \dots, 4$.

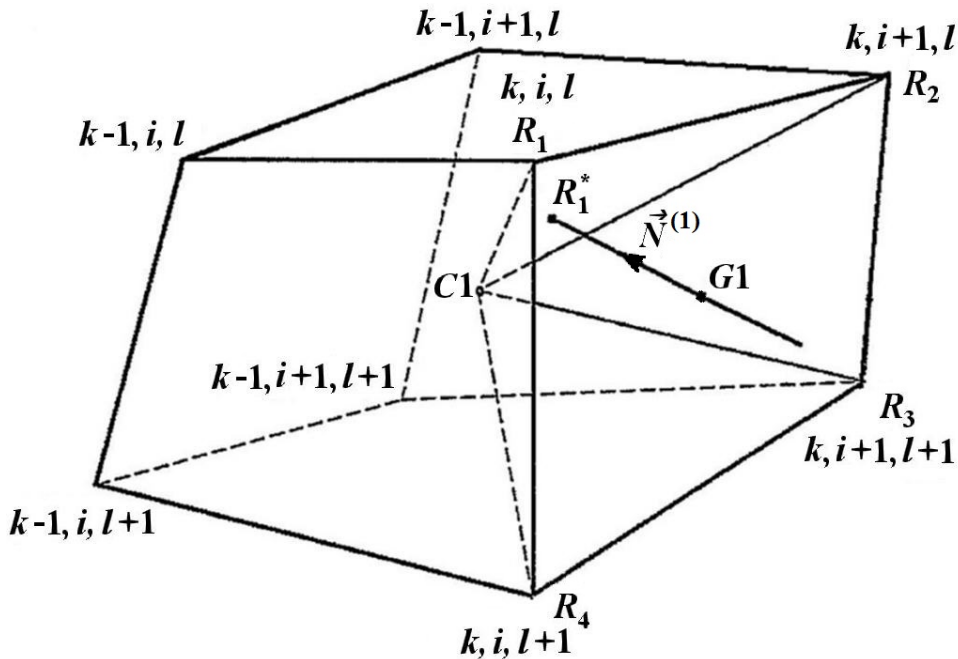


Рис. 7. К вычислению производной по нормали к грани ячейки

Для начала центральная точка $C1 \equiv R_{C1}$ ячейки сетки $\Omega1 \equiv \Omega_{k-1,i,l}$, соседней к ячейке консервативности, соединяется отрезками прямых с вершинами рассматриваемой грани $\Gamma1$. При этом образуется четыре пространственных треугольника: $R_{C1}R_1R_2$, $R_{C1}R_2R_3$, $R_{C1}R_3R_4$, $R_{C1}R_4R_1$ (см. рис. 7), которые для краткости будем называть *интерполяционными треугольниками*. В качестве центральной выбирается точка с координатами, равными средним арифметическим координат вершин ячейки. Так, для ячейки $\Omega0 \equiv \Omega_{k,i,l}$, изображенной на рис. 1:

$$\vec{R}_{C0} = 0,125 \left(\vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \vec{R}_3 + \vec{R}_4 + \vec{R}_5 + \vec{R}_6 + \vec{R}_7 + \vec{R}_8 \right). \quad (50)$$

Затем ищется точка пересечения R^* прямой, проходящей в направлении нормали через точку $G1$, с одним из интерполяционных треугольников — *точка интерполирования температуры*. В знак того, что эта точка лежит в ячейке $\Omega1$, добавим к обозначению точки пересечения соответствующий нижний индекс, так что $R^* = R_1^*$.

Значение температуры T_{C1} в ячейке $\Omega1$ будем считать определенным в центральной точке R_{C1} (50) (см. рис. 7). Кроме того, определены температуры в вершинах грани $\Gamma1$: T_1, T_2, T_3, T_4 . Они определяются как средние арифметические значений температуры в тех восьми ячейках, для которых данная вершина является общей.

Значение температуры T_1^* в точке интерполирования R_1^* определяется с помощью барицентрических координат [15] по значениям температуры в вершинах треугольника, в котором расположена точка R_1^* (см. далее). На рис. 7 это треугольник $R_{C1}R_1R_2$.

Аналогичное построение выполняется в самой ячейке консервативности $\Omega0 \equiv \Omega_{k,i,l}$. Вычисляются координаты точки интерполирования температуры, являющейся точкой пересечения $R_0^{(1)*}$ прямой, нормальной к общей грани $\Gamma1$, с одним из треугольников в ячейке $\Omega0 \equiv \Omega_{k,i,l}$, и определяется значение температуры $T_0^{(1)*}$ в этой точке. У величин $R_0^{(1)*}$ и $T_0^{(1)*}$ нижний индекс 0 указывает номер ячейки, в которой они определены ($\Omega0$), а верхний (γ), $\gamma = \overline{1,6}$, — номер грани, для которой вычисляется производная $\frac{\partial T}{\partial N(\gamma)}$.

Разностная производная температуры по нормали на грани $\Gamma1$ вычисляется по формуле

$$\frac{\partial T}{\partial N^{(1)}} = \frac{T_1^* - T_0^{(1)*}}{h_1}, \quad (51)$$

где $h_1 = \sqrt{\left(x_1^* - x_0^{(1)*}\right)^2 + \left(y_1^* - y_0^{(1)*}\right)^2 + \left(z_1^* - z_0^{(1)*}\right)^2}$ — длина отрезка $R_1^*R_0^{(1)*}$.

Найдем точку пересечения R_1^* прямой, проходящей в направлении нормали $\vec{N}^{(1)} = (N_x^{(1)}, N_y^{(1)}, N_z^{(1)})$ (32) через центральную точку $G1$ грани $\Gamma1$, с одним из треугольников $R_{C1}R_1R_2$, $R_{C1}R_2R_3$, $R_{C1}R_3R_4$, $R_{C1}R_4R_1$, расположенных в ячейке сетки $\Omega1 \equiv \Omega_{k-1,i,l}$ (см. рис. 7). Чтобы не загромождать изображение, на рис. 8 представлен только треугольник $R_{C1}R_1R_2$, с пересекающей его *нормальной* прямой. Точка $\vec{A} \equiv R_A$ — это конец единичного вектора нормали, исходящего из точки $G1$, так что $\vec{A} - \vec{G1} = \vec{N}^{(1)}$.

Уравнение плоскости, проходящей через три точки R_{C1}, R_1, R_2 , имеет следующий вид [16]:

$$\begin{vmatrix} x - x_{C1} & y - y_{C1} & z - z_{C1} \\ x_1 - x_{C1} & y_1 - y_{C1} & z_1 - z_{C1} \\ x_2 - x_{C1} & y_2 - y_{C1} & z_2 - z_{C1} \end{vmatrix} = 0,$$

или, что то же самое:

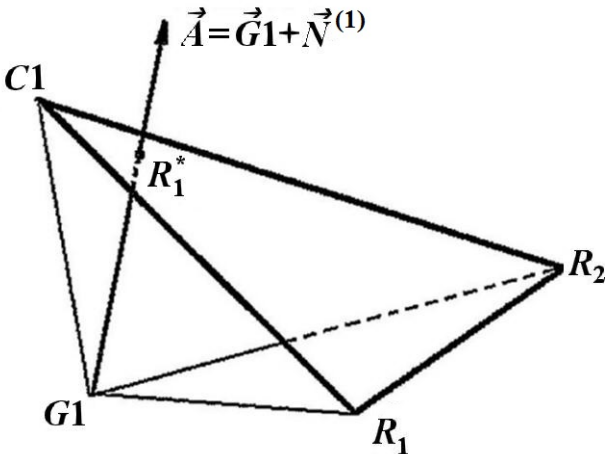


Рис. 8. Пересечение *нормальной* прямой с треугольником $R_{C1}R_1R_2$

$$(x - x_{C1}) S_{C1,1,2}^{YZ} + (y - y_{C1}) S_{C1,1,2}^{ZX} + (z - z_{C1}) S_{C1,1,2}^{XY} = 0, \quad (52)$$

где $S_{C1,1,2}^{YZ}$, $S_{C1,1,2}^{ZX}$, $S_{C1,1,2}^{XY}$ — площади проекций треугольника $R_{C1}R_1R_2$ на координатные плоскости OYZ , OZX , OXY соответственно. Параметрическое уравнение прямой, проходящей через точку $G1$ в направлении единичной нормали $\vec{N}^{(1)}$, записывается в виде

$$x = x_{G1} + N_x^{(1)}W, \quad y = y_{G1} + N_y^{(1)}W, \quad z = z_{G1} + N_z^{(1)}W. \quad (53)$$

Подставив координаты (53) в уравнение плоскости (52), получим

$$\begin{aligned} & \left(N_x^{(1)} S_{C1,1,2}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{C1,1,2}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{C1,1,2}^{XY} \right) W = \\ & = - (x_{G1} - x_{C1}) S_{C1,1,2}^{YZ} - (y_{G1} - y_{C1}) S_{C1,1,2}^{ZX} - (z_{G1} - z_{C1}) S_{C1,1,2}^{XY}. \end{aligned}$$

Отсюда с учетом равенства $-S_{C1,1,2} = S_{C1,2,1}$ следует, что параметр W в точке пересечения прямой (53) с плоскостью (52) принимает значение

$$W = \frac{(x_{G1} - x_{C1}) S_{C1,2,1}^{YZ} + (y_{G1} - y_{C1}) S_{C1,2,1}^{ZX} + (z_{G1} - z_{C1}) S_{C1,2,1}^{XY}}{N_x^{(1)} S_{C1,1,2}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{C1,1,2}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{C1,1,2}^{XY}}, \quad (54)$$

а координаты искомой точки пересечения $\vec{R}_1^* = (x_1^*, y_1^*, z_1^*)$ выражаются формулами

$$x_1^* = x_{G1} + N_x^{(1)}W, \quad y_1^* = y_{G1} + N_y^{(1)}W, \quad z_1^* = z_{G1} + N_z^{(1)}W, \quad (55)$$

где W определяется равенством (54).

Выразим координаты (55) точки пересечения \vec{R}_1^* через барицентрические координаты относительно четырех базисных точек $\vec{R}_1 = (x_1, y_1, z_1)$, $\vec{R}_2 = (x_2, y_2, z_2)$, $\vec{R}_{C1} = (x_{C1}, y_{C1}, z_{C1})$, $\vec{R}_{G1} = (x_{G1}, y_{G1}, z_{G1})$ (см. рис. 8), которые являются вершинами тетраэдра $\vec{R}_{C1}\vec{R}_2\vec{R}_1\vec{R}_{G1}$ и не лежат в одной плоскости.

Барицентрические координаты в трехмерном пространстве определяются четырьмя числами a, b, c, d , которые для любой точки, в данном случае $\vec{R}_1^* = (x_1^*, y_1^*, z_1^*)$, удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{aligned} a + b + c + d &= 1; \\ ax_1 + bx_2 + cx_{C1} + dx_{G1} &= x_1^*; \\ ay_1 + by_2 + cy_{C1} + dy_{G1} &= y_1^*; \\ az_1 + bz_2 + cz_{C1} + dz_{G1} &= z_1^*. \end{aligned}$$

В результате решения этой системы получим выражения для барицентрических координат a_1, b_1, c_1, d_1 точки \vec{R}_1^* через ее декартовы координаты:

$$a_1 = \frac{1}{P_{G1,1,2}} [(x_1^* - x_{G1}) S_{G1,2,C1}^{YZ} + (y_1^* - y_{G1}) S_{G1,2,C1}^{ZX} + (z_1^* - z_{G1}) S_{G1,2,C1}^{XY}]; \quad (56)$$

$$b_1 = \frac{1}{P_{G1,1,2}} [(x_1^* - x_{G1}) S_{G1,C1,1}^{YZ} + (y_1^* - y_{G1}) S_{G1,C1,1}^{ZX} + (z_1^* - z_{G1}) S_{G1,C1,1}^{XY}]; \quad (57)$$

$$c_1 = \frac{1}{P_{G1,1,2}} [(x_1^* - x_{G1}) S_{G1,1,2}^{YZ} + (y_1^* - y_{G1}) S_{G1,1,2}^{ZX} + (z_1^* - z_{G1}) S_{G1,1,2}^{XY}]; \quad (58)$$

$$d_1 = 1 - a_1 - b_1 - c_1, \quad (59)$$

где

$$P_{G1,1,2} = (x_{C1} - x_{G1}) S_{G1,1,2}^{YZ} + (y_{C1} - y_{G1}) S_{G1,1,2}^{ZX} + (z_{C1} - z_{G1}) S_{G1,1,2}^{XY}. \quad (60)$$

Подставив в (56)–(58) координаты точки \vec{R}_1^* (55), получим

$$a_1 = \frac{W}{P_{G1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,2,C1}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,2,C1}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,2,C1}^{XY} \right); \quad (61)$$

$$b_1 = \frac{W}{P_{G1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,C1,1}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,C1,1}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,C1,1}^{XY} \right); \quad (62)$$

$$c_1 = \frac{W}{P_{G1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,1,2}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,1,2}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,1,2}^{XY} \right), \quad (63)$$

где W определяется формулой (54).

Заметим, что числитель дроби в правой части формулы (54) и знаменатель $P_{G1,1,2}$ (60) в правой части формул (61)–(63) выражают утроенный объем одного и того же тетраэдра $R_{C1}R_2R_1R_{G1} \equiv R_{C1}R_1R_2R_{C1}$, изображенного на рис. 8, и поэтому равны между собой. С учетом этого формулы для барицентрических координат (61)–(63) приводятся к следующему виду, который не содержит декартовых координат точки \vec{R}_1^* :

$$a_1 = \frac{1}{P_{C1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,2,C1}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,2,C1}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,2,C1}^{XY} \right); \quad (64)$$

$$b_1 = \frac{1}{P_{C1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,C1,1}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,C1,1}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,C1,1}^{XY} \right); \quad (65)$$

$$c_1 = \frac{1}{P_{C1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,1,2}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,1,2}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,1,2}^{XY} \right), \quad (66)$$

где $P_{C1,1,2} = N_x^{(1)} S_{C1,1,2}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{C1,1,2}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{C1,1,2}^{XY}$.

Непосредственной проверкой можно убедиться, что имеет место равенство $a_1 + b_1 + c_1 = 1$. Для этого в формулах (64)–(66) площади проекций треугольников нужно выразить через координаты их вершин и провести необходимые вычисления. Тогда в соответствии с (59) имеем: $d_1 = 1 - a_1 - b_1 - c_1 = 0$.

Таким образом, координаты точки пересечения $\vec{R}_1^* = (x_1^*, y_1^*, z_1^*)$ (см. рис. 8) можно вычислять по формулам

$$x_1^* = a_1 x_1 + b_1 x_2 + c_1 x_{C1}; \quad y_1^* = a_1 y_1 + b_1 y_2 + c_1 y_{C1}; \quad z_1^* = a_1 z_1 + b_1 z_2 + c_1 z_{C1}, \quad (67)$$

где (x_{C1}, y_{C1}, z_{C1}) , (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2) — соответственно координаты вершин \vec{R}_{C1} , \vec{R}_1 и \vec{R}_2 треугольника $R_{C1}R_1R_2$ (см. рис. 8), в котором содержится точка \vec{R}_1^* ; значения a_1 , b_1 вычисляются по формулам (64), (65); $c_1 = 1 - a_1 - b_1$. Но прежде чем воспользоваться формулами (67), среди интерполяционных треугольников $R_{C1}R_1R_2$, $R_{C1}R_2R_3$, $R_{C1}R_3R_4$, $R_{C1}R_4R_1$, (см. рис. 7) нужно найти тот, для которого $a_1 \geq 0$, $b_1 \geq 0$, $c_1 \geq 0$. Именно в этом треугольнике будет лежать точка пересечения \vec{R}_1^* .

Эти же барицентрические координаты используются для вычисления значения температуры T_1^* в точке пересечения \vec{R}_1^* :

$$T_1^* = a_1 T_1 + b_1 T_2 + c_1 T_{C1}, \quad (68)$$

где T_1 , T_2 — усредненные по ячейкам значения температуры в узлах сетки \vec{R}_1 и \vec{R}_2 .

Аналогично вычисляются координаты точки $R_0^{(1)*}$ пересечения нормальной прямой, проходящей через центральную точку грани Γ_1 , с одним из интерполяционных треугольников, расположенных в ячейке консервативности Ω_0 . Значение температуры в точке $R_0^{(1)*}$ вычисляется по формуле

$$T_0^{(1)*} = a_0^{(1)} T_1 + b_0^{(1)} T_2 + c_0^{(1)} T_{C0},$$

которая отличается от (68) только тем, что в ней используется температура T_{C0} в центральной точке ячейки Ω_0 . Барицентрические координаты $a_0^{(1)}$, $b_0^{(1)}$, $c_0^{(1)}$ точки $R_0^{(1)*}$ также отличаются от

барицентрических координат точки R_1^* (64)–(66) только тем, что в аналогичных формулах вместо точки $C1$ в них всюду используется центральная точка $C0$ ячейки консервативности $\Omega 0$.

После того, как найдены обе точки пересечения R_1^* , $R_0^{(1)*}$ и значения температуры T_1^* , $T_0^{(1)*}$ в этих точках, разностное выражение для производной температуры по нормали, проведенной из центра грани $\Gamma 1$, определяется формулой (51).

Аналогично вычисляются потоки для остальных граней.

Линеаризация уравнений теплового баланса

Запишем разностный аналог закона сохранения энергии (26) для внутренней ячейки сетки $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,i,l}$ ($k = 2, \dots, N_k - 2$; $i = 2, \dots, N_i - 2$; $l = 2, \dots, N_l - 2$) в следующем виде:

$$M_0 \frac{E_0^{n+1} - E_0^n}{\tau^{n+1/2}} = \sum_{\gamma=1}^6 S_\gamma \chi_{0\gamma}^{n+1} \frac{(T_\gamma^*)^{n+1} - (T_0^{(\gamma)*})^{n+1}}{h_\gamma}, \quad (69)$$

где $\frac{(T_\gamma^*)^{n+1} - (T_0^{(\gamma)*})^{n+1}}{h_\gamma} = \left(\frac{\partial T}{\partial N(\gamma)} \right)^{n+1}$ — разностная производная температуры по нормали к грани Γ_γ ячейки $\Omega 0$; h_γ — шаг по пространству между точками \vec{R}_γ^* и $\vec{R}_0^{(\gamma)*}$.

В уравнениях теплового баланса для приграничных ячеек сетки нужно учитывать граничные условия.

Пусть, например, на одной из граней Γm приграничной ячейки задана граничная температура $T = T_{\Gamma m}$ (2). В этом случае полагаем: $\vec{R}_m^* = \vec{R}_{Gm}$, где \vec{R}_{Gm} — центральная точка грани. Значение температуры в этой точке берется равным заданной граничной температуре: $T_m^* = T_{\Gamma m}$.

Предположим, что на некоторой грани Γn приграничной ячейки $\Omega 0$ в явном виде задан поток тепла $Q = Q_{\Gamma n}$ (3). Тогда уравнение теплового баланса (69) для этой ячейки можно записать в следующем виде:

$$M_0 \frac{E_0^{n+1} - E_0^n}{\tau^{n+1/2}} = \sum_{\substack{\gamma \neq n \\ \gamma=1}}^6 S_\gamma \chi_{0\gamma}^{n+1} \frac{(T_\gamma^*)^{n+1} - (T_0^{(\gamma)*})^{n+1}}{h_\gamma} + S_n Q_{\Gamma n}.$$

Пусть на грани Γq ячейки консервативности $\Omega 0$ задано граничное условие типа *свободная поверхность* (4). Особенность этого условия состоит в том, что функция потока излучения на свободной поверхности является нелинейной функцией температуры. В данной работе используется неявная аппроксимация этого граничного условия. Уравнение теплового баланса записывается в виде

$$M_0 \frac{E_0^{n+1} - E_0^n}{\tau^{n+1/2}} = \sum_{\substack{\gamma \neq q \\ \gamma=1}}^6 S_\gamma \chi_{0\gamma}^{n+1} \frac{(T_\gamma^*)^{n+1} - (T_0^{(\gamma)*})^{n+1}}{h_\gamma} + S_q \Phi_0^{n+1}, \quad (70)$$

где $\Phi_0^{n+1} = -0,25\sigma c (T_0^{n+1})^4$.

Заметим, что приграничная ячейка сетки может иметь одну, две или три граничные грани. Тип граничного условия на каждой из этих граней нужно рассматривать отдельно.

Зависимость внутренней энергии от температуры $E = E(\rho, T)$ в уравнении теплопроводности (1) в общем случае является нелинейной. Поэтому и система уравнений (69) нелинейна относительно искомых значений температуры. Для ее решения используется итерационный метод типа метода Ньютона. Применяется линеаризация путем разложения функции $E = E(\rho, T)$ в ряд Тейлора по степеням приращения температуры на итерациях:

$$E_{k,i,l}^{\nu+1} = E_{k,i,l}^\nu + K_{k,i,l}^\nu (T_{k,i,l}^{\nu+1} - T_{k,i,l}^\nu) + O(\delta_{k,i,l}^2),$$

где ν — номер итерации по нелинейности; $K(\rho, T) = \frac{\partial E(\rho, T)}{\partial T}$; слагаемые, квадратичные по $\delta_{k,i,l} = T_{k,i,l}^{n+1} - T_{k,i,l}^n$, отбрасываются. В предположении, что итерации по нелинейности уравнения состояния $E = E(\rho, T)$ сошлись, имеют место равенства

$$\left\{ T_{k,i,l}^{n+1} \right\} = \left\{ T_{k,i,l}^{\nu+1} \right\}; \quad \left\{ E_{k,i,l}^{n+1} \right\} = \left\{ E_{k,i,l}^{\nu+1} \right\}, \quad \text{где } E_{k,i,l}^{\nu+1} = E\left(\rho_{k,i,l}, T_{k,i,l}^{\nu+1}\right).$$

Тогда приращение удельной внутренней энергии на шаге по времени в ячейке сетки $\Omega_0 \equiv \Omega_{k,i,l}$ представляется в виде

$$E_{k,i,l}^{n+1} - E_{k,i,l}^n = E_{k,i,l}^{\nu+1} - E_{k,i,l}^n = K_{k,i,l}^\nu \left(T_{k,i,l}^{\nu+1} - T_{k,i,l}^\nu \right) + E_{k,i,l}^\nu - E_{k,i,l}^n.$$

Подставив в уравнения (69), получим

$$\frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} K_0^\nu \left(T_0^{\nu+1} - T_0^\nu \right) + \frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} \left(E_0^\nu - E_0^n \right) = \sum_{\gamma=1}^6 S_\gamma \chi_{0\gamma}^\nu \frac{\left(T_\gamma^* \right)^{\nu+1} - \left(T_0^{(\gamma)*} \right)^{\nu+1}}{h_\gamma}. \quad (71)$$

Система линейных уравнений (71) служит для итерационного вычисления новых значений температуры $T^{n+1} = \left\{ T_{k,i,l}^{n+1} \right\}$ и энергии $E^{n+1} = \left\{ E_{k,i,l}^{n+1} = E\left(\rho_{k,i,l}, T_{k,i,l}^{n+1}\right) \right\}$. При этом параллельно с вычислением температуры в итерационный процесс в режиме простой итерации вовлекается и вычисление коэффициентов теплопроводности $\chi^{n+1} = \left\{ \chi_{k,i,l}^{n+1} = \chi\left(\rho_{k,i,l}, T_{k,i,l}^{n+1}\right) \right\}$, зависящих от температуры. Условия сходимости такого итерационного процесса исследовались, например, в работе [17]. Иногда в целях экономии времени счета в процессе проведения итераций рекомендуется ограничиться двумя-тремя итерациями по нелинейности коэффициента теплопроводности. Устойчивость счета тепловых волн при такой организации итерационного процесса исследовалась в работах [18, 19].

Нелинейное граничное условие $\Phi_0^{n+1} = -0,25\sigma c \left(T_0^{n+1} \right)^4$, задающее поток излучения на некоторой грани Γ_γ приграничной ячейки Ω_0 (70), линеаризуется по методу Ньютона. Соответственно итерационный процесс вычисления $\Phi_0^{\nu+1}$, совмещенный с итерациями по нелинейности уравнения состояния и коэффициентов теплопроводности, проводится в режиме итераций по методу Ньютона, а не в режиме простой итерации. Линеаризация функции $\Phi(T)$ проводится по аналогии с уравнением состояния $E = E(\rho, T)$. Записывается разложение функции потока излучения в ряд Тейлора по степеням приращения температуры на итерациях по нелинейности, и после отбрасывания квадратичных слагаемых имеем

$$\Phi_0^{\nu+1} = \Phi_0^\nu - \sigma c \left(T_0^\nu \right)^3 \left(T_0^{\nu+1} - T_0^\nu \right) = -0,25\sigma c \left(T_0^\nu \right) - \sigma c \left(T_0^\nu \right)^3 \left(T_0^{\nu+1} - T_0^\nu \right). \quad (72)$$

С учетом выражения для потока излучения на итерациях $\Phi_0^{\nu+1}$ (72) получаем линейное относительно температуры на итерациях уравнение теплового баланса в приграничной ячейке сетки Ω_0 :

$$\begin{aligned} & \frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} K_0^\nu \left(T_0^{\nu+1} - T_0^\nu \right) + \frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} \left(E_0^\nu - E_0^n \right) = \\ & = \sum_{\substack{\gamma=1 \\ \gamma \neq q}}^6 S_\gamma \chi_{0\gamma}^\nu \frac{\left(T_\gamma^* \right)^{\nu+1} - \left(T_0^{(\gamma)*} \right)^{\nu+1}}{h_\gamma} - S_q \sigma c \left(T_0^\nu \right)^3 \left(T_0^{\nu+1} - T_0^\nu \right) - 0,25 S_q \sigma c \left(T_0^\nu \right)^4. \end{aligned}$$

Коэффициенты линеаризованных уравнений

Запишем линеаризованное уравнение теплового баланса для ячейки консервативности $\Omega_0 \equiv \Omega_{k,i,l}$ в следующем виде:

$$\Lambda_0^\nu T_0^{\nu+1} - \sum_{\gamma=1}^6 Q_\gamma^{\nu+1} = F_0, \quad (73)$$

где

$$\begin{aligned} \Lambda_0^\nu &= \frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} K_0^\nu; & F_0 &= \frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} [K_0^\nu T_0^\nu - (E_0^\nu - E_0^n)]; \\ Q_\gamma^{\nu+1} &= \frac{S_\gamma \chi_{0\gamma}^\nu}{h_\gamma} \left[(T_\gamma^*)^{\nu+1} - (T_0^{(\gamma)*})^{\nu+1} \right], & \gamma &= \overline{1, 6}. \end{aligned} \quad (74)$$

Учитывая, что в формулах для потоков (74) используются усредненные по ячейкам значения температуры в узлах сетки, эти потоки можно представить в следующем виде:

$$Q_\gamma^{\nu+1} = \frac{S_\gamma \chi_{0\gamma}^\nu}{h_\gamma} \sum_{m=0}^{26} \lambda_m^{(\gamma)} T_m^{\nu+1} = \sum_{m=0}^{26} \left(\Lambda_m^{(\gamma)} \right)^\nu T_m^{(\nu+1)}, \quad (75)$$

где

$$\left(\Lambda_m^{(\gamma)} \right)^\nu = \frac{S_\gamma \chi_{0\gamma}^\nu}{h_\gamma} \lambda_m^{(\gamma)}, \quad \gamma = \overline{1, 6}, \quad m = 0, 1, \dots, 26.$$

Нижний индекс m при значениях температуры T_m и совпадающий с ним нижний индекс при коэффициентах $\lambda_m^{(\gamma)}$ в формуле (75) обозначают локальный номер ячейки сетки (44)–(49), в которой определена температура. Заметим, что в этой формуле на каждой грани реально могут использоваться значения температуры не более чем в 18 ячейках сетки (см. рис. 4–6). Остальные коэффициенты полагаются равными нулю.

Нужно выразить коэффициенты при значениях температуры линеаризованной системы уравнений теплового баланса через коэффициенты в формулах для тепловых потоков (75) на гранях ячейки сетки. Для этого запишем уравнение (73), представляя его левую часть в виде линейной комбинации 27 значений температуры в ячейках сетки, составляющих сеточный шаблон (см. рис. 4–6) для ячейки консервативности $\Omega_0 \equiv \Omega_{k,i,l}$:

$$\sum_{m=0}^{26} A_m^\nu T_m^{\nu+1} = F_0. \quad (76)$$

Далее, подставив выражения (75) для тепловых потоков на гранях ячейки Ω_0 в левую часть уравнения (73), получим следующие формулы для коэффициентов A_m^ν , $m = 0, 1, \dots, 26$, при неизвестных значениях температуры $T_m^{\nu+1}$ в уравнении (76):

$$A_0^\nu = \Lambda_0^\nu - \sum_{\gamma=1}^6 \left(\Lambda_0^{(\gamma)} \right)^\nu; \quad A_m^\nu = - \sum_{\gamma=1}^6 \left(\Lambda_m^{(\gamma)} \right)^\nu, \quad m = \overline{1, 26}. \quad (77)$$

После того, как будут вычислены все коэффициенты $\left(\Lambda_m^{(\gamma)} \right)^\nu$ при температурах $T_m^{\nu+1}$ в формулах для тепловых потоков (75), по формулам (77) найдем численные значения коэффициентов при неизвестных температурах в уравнении (76).

Представим краткое описание алгоритма вычисления коэффициентов $\lambda_m^{(\gamma)}$ в правой части одной из формул (75), записанной для разности $\Delta T_\gamma = T_\gamma^* - T_0^{(\gamma)*}$ из (74) на некоторой грани Γ_γ ячейки $\Omega_0 \equiv \Omega_{k,i,l}$.

Сначала по формулам (32) вычисляются координаты единичной нормали $\vec{N}^{(\gamma)}$ к рассматриваемой грани. Определяются центральные точки соседствующих ячеек Ω_0 и Ω_γ . Центральные точки каждой из двух ячеек соединяются отрезками прямых с вершинами их общей грани Γ_γ . При этом в каждой из ячеек образуется по четыре пространственных треугольника. Прямая линия Π_γ , проходящая через центральную точку рассматриваемой грани в направлении нормали, пересекает один из треугольников в ячейке Ω_0 и один из треугольников в ячейке Ω_γ . Для поиска этих треугольников используются барицентрические координаты a , b , подобные вычисляемым по (64), (65), и $c = 1 - a - b$.

После того, как оба треугольника, $R_{C\gamma}R_{j\gamma}R_{j\gamma+1}$ (в ячейке $\Omega\gamma$) и $R_{C0}R_{j0}R_{j0+1}$ (в ячейке $\Omega0$), найдены, с помощью тех же барицентрических координат вычисляются координаты точек пересечения (67), а также значения температуры T_γ^* и $T_0^{(\gamma)*}$ в этих точках. Тогда

$$\Delta T_\gamma = T_\gamma^* - T_0^{(\gamma)*} = a_\gamma T_{j\gamma} + b_\gamma T_{j\gamma+1} + c_\gamma T_{C\gamma} - a_0^{(\gamma)} T_{j0} - b_0^{(\gamma)} T_{j0+1} - c_0^{(\gamma)} T_{C0}.$$

Подставив сюда выражения для усредненных значений температуры в узлах сетки $R_{j\gamma}$, $R_{j\gamma+1}$, R_{j0} , R_{j0+1} , после перегруппировки слагаемых получим искомые коэффициенты $\lambda_m^{(\gamma)}$ при значениях температуры в формулах для тепловых потоков (75).

В заключение приведем запись линейаризованной системы уравнений теплового баланса (76), используя вместо локальной нумерации ячеек сетки глобальную индексацию значений температуры в ячейках сетки и положив $Am_{k,i,l}^\nu \equiv A_m^\nu$:

$$\begin{aligned} & A0_{k,i,l}^\nu T_{k,i,l}^{\nu+1} + A1_{k,i,l}^\nu T_{k-1,i,l}^{\nu+1} + A2_{k,i,l}^\nu T_{k+1,i,l}^{\nu+1} + A3_{k,i,l}^\nu T_{k,i-1,l}^{\nu+1} + A4_{k,i,l}^\nu T_{k,i+1,l}^{\nu+1} + \\ & + A5_{k,i,l}^\nu T_{k,i,l-1}^{\nu+1} + A6_{k,i,l}^\nu T_{k,i,l+1}^{\nu+1} + A7_{k,i,l}^\nu T_{k-1,i-1,l}^{\nu+1} + A8_{k,i,l}^\nu T_{k-1,i+1,l}^{\nu+1} + \\ & + A9_{k,i,l}^\nu T_{k-1,i,l-1}^{\nu+1} + A10_{k,i,l}^\nu T_{k-1,i,l+1}^{\nu+1} + A11_{k,i,l}^\nu T_{k+1,i-1,l}^{\nu+1} + A12_{k,i,l}^\nu T_{k+1,i+1,l}^{\nu+1} + \\ & + A13_{k,i,l}^\nu T_{k+1,i,l-1}^{\nu+1} + A14_{k,i,l}^\nu T_{k+1,i,l+1}^{\nu+1} + A15_{k,i,l}^\nu T_{k,i-1,l-1}^{\nu+1} + A16_{k,i,l}^\nu T_{k,i+1,l-1}^{\nu+1} + \\ & + A17_{k,i,l}^\nu T_{k,i+1,l+1}^{\nu+1} + A18_{k,i,l}^\nu T_{k,i-1,l+1}^{\nu+1} + A19_{k,i,l}^\nu T_{k-1,i-1,l-1}^{\nu+1} + A20_{k,i,l}^\nu T_{k-1,i+1,l-1}^{\nu+1} + \\ & + A21_{k,i,l}^\nu T_{k-1,i+1,l+1}^{\nu+1} + A22_{k,i,l}^\nu T_{k-1,i-1,l+1}^{\nu+1} + A23_{k,i,l}^\nu T_{k+1,i-1,l-1}^{\nu+1} + A24_{k,i,l}^\nu T_{k+1,i+1,l-1}^{\nu+1} + \\ & + A25_{k,i,l}^\nu T_{k+1,i+1,l+1}^{\nu+1} + A26_{k,i,l}^\nu T_{k+1,i-1,l+1}^{\nu+1} = F_{k,i,l}. \end{aligned} \quad (78)$$

Система линейных уравнений (78) служит для итерационного решения нелинейных уравнений теплового баланса (69), т. е. для вычисления новых значений температуры $T^{n+1} = \{T_{k,i,l}^{n+1}\}$ и энергии $E^{n+1} = \{E_{k,i,l}^{n+1} = E(\rho_{k,i,l}, T_{k,i,l}^{n+1})\}$ на шаге по времени. Для получения решения системы (78) можно использовать одну из библиотек решателей систем линейных уравнений, например [20].

Заключение

Представлена разностная схема решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности на структурированной прямоугольной сетке, состоящей из произвольных шестигранников с линейчатыми гранями. Разностная схема строится на основе разностного аналога закона сохранения энергии, записанного для ячеек пространственной сетки, является полностью неявной, без расщепления по пространственным направлениям. Используется аппроксимация тепловых потоков на гранях ячеек сетки, предложенная для двумерного случая в методике СИГМА.

Последовательно придерживаясь изначально принятого соглашения о линейчатости граней ячейки, получены формулы для объема ячейки и вектора нормали в центре грани ячейки. Дается определение площади грани, через которую ячейка обменивается теплом, основанное на понятии векторной, или ориентированной, площади линейчатой поверхности в трехмерном пространстве.

Показано, что барицентрические координаты точек, в которых определяются интерполированные температуры для вычисления тепловых потоков, можно получить еще до того, как вычислены декартовы координаты этих точек. Это значительно упрощает вычисления.

Список литературы

1. Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967.
Yanenko N. N. Metod drobnuykh shagov resheniya mnogomernykh zadach matematicheskoy fiziki. Novosibirsk: Nauka, 1967.

2. Годунов С. К., Рябенкий В. С. Введение в теорию разностных схем. М.: Физматлит, 1962.
Godunov S. K., Ryabenkiy V. S. Vvedenie v teoriyu raznostnykh skhem. M.: Fizmatlit, 1962.
3. Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф., Авдеев П. А., Артамонов М. В., Бакулина Е. А., Безрукова И. Ю., Борляев В. В., Володина Н. А., Наумов А. О., Огнева Н. Э., Резвова Т. В., Резяпов А. А., Стародубов С. В., Тарадай И. Ю., Тихонова А. П., Циберева К. В., Шанин А. А., Ширшова М. О., Шувалова Е. В. Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41–50.
Bakhrakh S. M., Velichko S. V., Spiridonov V. F., Avdeev P. A., Artamonov M. V., Bakulina E. A., Bezrukova I. Yu., Borlyayev V. V., Volodina N. A., Naumov A. O., Ogneva N. E., Rezvova T. V., Rezyapov A. A., Starodubov S. V., Taraday I. Yu., Tikhonova A. P., Tsiberev K. V., Shanin A. A., Shirshova M. O., Shuvalova E. V. Metodika LEGAK-3D rascheta trekhmernykh nestatsionarnykh techeniy mnogokomponentnoy sploshnoy sredy i printsipy ee realizatsii na mnogoprotsessornykh EVM s raspredelennoy pam'yatyu // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2004. Vyp. 4. S. 41–50.
4. Алексеев А. В., Беляков И. М., Бочков А. И., Евдокимов В. В., Ириничев Е. А., Морозов В. Ю., Москвин А. Н., Нурждин А. А., Пепеляев М. П., Резчиков В. Ю., Сучкова В. В., Шагалмиев Р. М., Шарифуллин Э. Ш., Шемякина Т. В., Шумилин В. А. Методика САТУРН-2005. Математические модели, алгоритмы и программы решения многомерных задач переноса частиц и энергии // Там же. 2013. Вып. 4. С. 17–30.
Alekseev A. V., Belyakov I. M., Bochkov A. I., Evdokimov V. V., Irinichev E. A., Morozov V. Yu., Moskvina A. N., Nuzhdin A. A., Pepelyayev M. P., Rezchikov V. Yu., Suchkova V. V., Shagaliev R. M., Sharifullin E. Sh., Shemyakina T. V., Shumilin V. A. Metodika SATURN-2005. Matematicheskie modeli i programmy resheniya mnogomernykh zadach perenosa chastits i energii // Tam zhe. 2013. Vyp. 4. S. 17–30.
5. Трошчьев В. Е., Шагалмиев Р. М. Класс интерполяционно-инвариантных схем для численного решения уравнения теплопроводности // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1983. Вып. 3. С. 73–76.
Troshchiev V. E., Shagaliev R. M. Klass interpol'yatsionno-invariantnykh skhem dlya chislennogo resheniya uravneniya teploprovodnosti // Tam zhe. Ser. Metodiki i programmy chislennogo resheniya zadach matematicheskoy fiziki. 1983. Vyp. 3. S. 73–76.
6. Панов А. И., Соболев И. В. Трехмерная методика расчета диффузионных процессов на неструктурированных сетках // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 1. С. 46–54.
Panov A. I., Sobolev I. V. Trekhmernaya metodika rascheta diffusionnykh protsessov na nestrukturirovannykh setkakh // Tam zhe. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2007. Vyp. 1. S. 46–54.
7. Бабанов А. В., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Ватулин В. В., Винокуров О. А., Гречишклина И. Н., Змушко В. В., Измайлова Т. Б., Митрофанов Е. И., Рябикина Н. А., Шамраев Б. Н. Методика МИМОЗА-НДЗД. Расчет трехмерных задач спектрального переноса излучения // Там же. 2012. Вып. 2. С. 64–72.
Babanov A. V., Belkov S. A., Bondarenko S. V., Vatulin V. V., Vinokurov O. A., Grechishkina I. N., Zmushko V. V., Izmaylova T. B., Mitrofanov E. I., Ryabikina N. A., Shamraev B. N. Metodika MEMOZA-ND3D. Raschet tryekhmernykh zadach spektralnogo perenosa izlucheniya // Tam zhe. 2012. Vyp. 2. S. 64–72.
8. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
Zeldovich Ya. B., Rayzer Yu. P. Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodinamicheskikh yavleniy. M.: Nauka, 1966.

9. Стенин А. М. Явная полностью консервативная вариационная разностная схема для решения системы уравнений газовой динамики в переменных Лагранжа // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 1. С. 3–16.
Stenin A. M. Yavnaya polnostyu konservativnaya variatsionnaya raznostnaya schema dlya resheniya sistemy uravneniy gazovoy dinamiki v peremennykh Lagranzha // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2012. Vyp. 1. S. 3–16.
10. Стенин А. М. Явная полностью консервативная вариационная разностная схема для решения системы уравнений газовой динамики в переменных Лагранжа // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2014. Вып. 19, ч. 1. С. 44–57.
Stenin A. M. Yavnaya polnostyu konservativnaya variatsionnaya raznostnaya skkhema dlya resheniya sistemy uravneniy gazovoy dinamiki v peremennykh Lagranzha // Trudy RFYaTs-VNIIEF. 2014. Vyp. 19, ch. 1. S. 44–57.
11. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1977.
Korn G., Korn T. Spravochnik po matematike. M.: Nauka, 1977.
12. 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 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 3. С. 32–46.
Avdoshina E. V., Bondarenko Yu. A., Gorbunov A. A., Dmitrieva Yu. S., Naumov A. O., Pronovich S. N., Rudko N. M., Tikhomirov B. P. Issledovanie tochnosti razlichnykh metodov usredneniya koeffitsienta teploprovodnosti na storone yacheiki integrirovaniya pri chislennom reshenii uravneniya teploprovodnosti // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2014. Vyp. 3. S. 32–46.
13. Баталова М. В., Бахрах С. М., Винокуров О. А., Загускин В. Л., Иванова Л. Н., Калманович А. И., Шиндерман И. Д. Комплекс СИГМА для расчета задач двумерной газодинамики // Всесоюз. семинар по численным методам механики вязкой жидкости: тез. докл. Новосибирск, 1969. С. 283.
Batalova M. V., Bakhrakh S. M., Vinokurov O. A., Zaguskin V. L., Ivanova L. N., Kalmanovich A. I., Shinderman I. D. Kompleks SIGMA dlya rascheta zadach dvumernoy gazodinamiki // Vsesoyuz. seminar po chislennum metodam mekhaniki vyzkoj zhidkosti: tez. dokl. Novosibirsk, 1969. S. 283.
14. Бондаренко Ю. А., Голубев А. А., Горбунов А. А., Наумов А. О., Панов А. И. О "шахматном эффекте" в некоторых разностных схемах для двумерной и трехмерной теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 49–53.
Bondarenko Yu. A., Golubev A. A., Gorbunov A. A., Naumov A. O., Panov A. I. O "shakhmatnom effekte" v nekotorykh raznostnykh skhemakh dlya dvumernoy i trekhmernoj teploprovodnosti // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2011. Vyp. 1. S. 49–53.
15. Ильин В. А., Позняк Э. Г. Аналитическая геометрия. М.: Наука, 1968.
Ilyin V. A., Poznyak E. G. Analiticheskaya geometriya. M.: Nauka, 1968.
16. Бронштейн И. Н., Семендяев К. А. Справочник по математике. М.: Госиздат, 1955.
Bronshhtein I. N., Semeendyaev K. A. Spravochnik po matematike. M.: Gosizdat, 1955.
17. Волчинская М. И. Об итерационной схеме решения квазилинейного уравнения теплопроводности // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1971. Т. 11, № 2. С. 518–520.
Volchinskaya M. I. Ob iteratsionnoy skheme resheniya kvazilineynogo uravneniya teploprovodnosti // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 1971. T. 11, № 2. S. 518–520.
18. 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. 3. С. 3–12.

- Bondarenko Yu. A., Gorbunov A. A.* Prakticheskie usloviya ustoychivosti dlya scheta teplovykh voln v neyavnykh raznostnykh skhemakh // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov.* 2008. Вып. 3. С. 3–12.
19. *Бондаренко Ю. А., Горбунов А. А., Тихомиров Б. П.* Практические условия устойчивости разностной схемы для решения уравнения теплопроводности с двукратным пересчетом значений коэффициента теплопроводности // Там же. 2016. Вып. 4. С. 20–25.
Bondarenko Yu. A., Gorbunov A. A., Tikhomirov B. P. Prakticheskie usloviya ustoychivosti raznostnoy skhemy dlya resheniya uravneniya teploprovodnosti s dvukratnym pereschetom znacheniy koeffitsienta teploprovodnosti // Там же. 2016. Вып. 4. С. 20–25.
20. *Карпов А. П., Бартенев Ю. Г., Ерзунов В. А., Петров Д. А., Стаканов А. Н., Щанникова Е. Б.* Решение СЛАУ в программных комплексах ИТМФ алгебраическими многосеточными методами // XVII межд. конф. "Супервычисления и математическое моделирование": сб. науч. трудов. Саров: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2019. С. 300–311.
Karpov A. P., Bartenev Yu. G., Erzunov V. A., Petrov D. A., Stakanov A. N., Shchannikova E. B. Reshenie SLAU v programmnykh kompleksakh ITMF algebraicheskimi mnogosetochnymi metodami // XVII mezhd. konf. "Supervychysleniya i matematicheskoe modelirovanie". Sarov: FGUP RFYaTs-VNIIEF ", 2019. С. 300–311.

Статья поступила в редакцию 19.03.2021.
