

РАСЧЕТ ЛУЧИСТОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В МЕТОДИКЕ МРС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕТОЧНЫХ МЕТОДОВ НЬЮТОНА

Ю. Н. Дерюгин, С. Н. Полищук, Б. П. Тихомиров

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

Одним из эффективных методов решения систем нелинейных уравнений является метод Ньютона. При достаточно хорошем начальном приближении метод сходится и вблизи решения обладает квадратичной сходимостью [1].

В 1982 году в работе [2] была предложена модификация метода Ньютона, в которой линейная система решалась приближенно по итерационной схеме. Число линейных итераций было значительно уменьшено, при этом скорость сходимости метода Ньютона сохранилась. Новый метод был назван неточным методом Ньютона. В нем для контроля точности решения линейной системы были введены управляющие параметры, в качестве которых была взята константа относительной точности. Два варианта выбора управляющих параметров были предложены и обоснованы в работе Айзенстата и Уокера [3].

Неточные методы Ньютона вошли в вычислительную практику, в частности, они используются для решения нелинейных уравнений в пакете решателей SUNDIALS (солнечные часы), разработанном в центре прикладных научных вычислений Ливерморской национальной лаборатории [4].

В настоящей работе кратко формулируется метод Ньютона, описывается класс неточных методов и проверяется их эффективность в рамках методики МРС, предназначенной для решения задач газодинамики с теплопроводностью, на примере двух тестовых задач.

1. Классический метод Ньютона

Пусть требуется найти решение системы нелинейных уравнений

$$F(x) = 0. \quad (1)$$

В дальнейшем всегда будем предполагать, что нелинейное отображение $F: R^n \rightarrow R^n$ обладает следующими свойствами:

- 1) уравнение (1) имеет решение, то есть в R^n существует точка x^* такая, что $F(x^*) = 0$;
- 2) $F(x)$ непрерывно дифференцируемо в окрестности точки x^* ;
- 3) в точке x^* матрица Якоби $F'(x)$ не вырождена.

Решение уравнения (1) будем искать итерациями. Пусть нам известно k -е приближение x_k к x^* . Предположим, что решение системы (1) достигается на $(k+1)$ -ой итерации. Раскладывая функцию $F(x)$ в ряд Тейлора в окрестности точки x_k и сохраняя в разложении два члена, получим систему линейных алгебраических уравнений относительно приращения Δx_k :

$$F'(x_k)\Delta x_k + F(x_k) = 0. \quad (2)$$

Следующее приближение находится по формуле

$$x_{k+1} = x_k + \Delta x_k. \quad (3)$$

Таким образом, каждый шаг итерационного процесса ($k = 0, 1, 2, \dots$) включает:

- 1) решение системы линейных алгебраических уравнений (2),
- 2) корректировку k -го приближения (3).

Процесс завершается при выполнении следующих условий: $\|F(x_k)\| \leq \varepsilon_f$, $\|\Delta x_k\| \leq \varepsilon_x$, где ε_f , ε_x – заданные константы.

Метод Ньютона является одним из наиболее эффективных итерационных методов. При достаточно хорошем начальном приближении x_0 он имеет квадратичную сходимость.

2. Класс неточных методов Ньютона

В методе Ньютона на каждой нелинейной итерации нужно находить точное решение системы линейных алгебраических уравнений (2). В этом состоит один из главных недостатков метода, так как при большом числе неизвестных для получения решения линейной системы с высокой точностью нужно выполнить большой объем вычислений, определяемый числом внутренних итераций.

В работе [2] была предложена модификация метода Ньютона, основанная на приближенном решении линейной системы с одновременным сохранением быстрой сходимости внешних итераций (итераций по нелинейности), характерной для классического метода. Новый метод авторы назвали неточным, подчеркнув тем самым, что линейная система решается не точно, а с некоторой, вполне определенной и регулируемой погрешностью. Метод строится с учетом двух очевидных моментов. Во-первых, пока точка x_k отстоит от искомого решения x^* достаточно далеко, нет необходимости проводить вычисления точно, и, во-вторых, точность решения линейной системы, по мере приближения x_k к x^* , должна быть согласована с квадратичной сходимостью классического метода.

В неточном методе оптимизация итерационного процесса производится с помощью управляющего параметра, в качестве которого выступает относительная погрешность решения линейной системы.

Обозначим невязку решения системы (2) через $r_k = F'(x_k)\Delta x_k + F(x_k)$.

Тогда уровень точности контролируется неравенством

$$\frac{\|r_k\|}{\|F(x_k)\|} \leq \eta_k. \quad (4)$$

С помощью последовательности неотрицательных чисел η_k можно управлять итерационным процессом. Основной вопрос – как выбирать η_k так, чтобы сократить число линейных итераций, сохранив квадратичную скорость сходимости.

По-видимому, неточные методы Ньютона стали активно использоваться в вычислительной практике после появления работы [3]. В ней отмечается, что если рассматриваемое нелинейное отображение $F(x_k)$, кроме указанных выше трех свойств, имеет непрерывную по Липшицу производную $F'(x_k)$

$$\|F'(x) - F'(x^*)\| \leq L \|x - x^*\|, \quad L \geq 0,$$

то сходимость:

- 1) q – линейная, если $0 \leq \eta_k \leq \eta_{\max} < 1$;
- 2) q – сверхлинейная, если $\lim \eta_k = 0$ при $k \rightarrow \infty$;
- 3) q – квадратичная, если $\eta_k = O(\|F(x_k)\|)$.

В работе [3] предложены и обоснованы два способа выбора управляющих параметров $\eta_k \in [0, 1)$, обеспечивающих достаточно быструю сходимость метода.

Первый вариант выбора «forcing terms» [3]:

$$\eta_k = \frac{\|F(x_k)\| - \|F(x_{k-1}) + F'(x_{k-1})\Delta x_{k-1}\|}{\|F(x_{k-1})\|}, \quad k=1, 2, \dots \quad (5)$$

При таком выборе управляющих параметров прослеживается прямая связь между нелинейной и линейной моделью.

Второй вариант выбора описывается формулой:

$$\eta_k = \gamma \left(\frac{\|F(x_k)\|}{\|F(x_{k-1})\|} \right)^\alpha, \quad k=1, 2, \dots, \quad (6)$$

где $\gamma \in [0,1]$, $\alpha \in (1,2]$, $\eta_0 \in [0,1)$.

3. Разностное уравнение в дельта-форме

Рассмотрим уравнение лучистой теплопроводности

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}(W) = 0, \quad W = -\chi \operatorname{grad}(T),$$

где $\rho = \rho(x, t)$ – плотность, $E = E(\rho, t)$ – удельная внутренняя энергия, $T(x, t)$ – температура, $\chi = \frac{lc}{3} 4\sigma T^3$ – коэффициент теплопроводности, l – эффективный пробег излучения, c – скорость света, σ – постоянная Стефана.

Для простоты изложения будем рассматривать одномерный случай, при этом сменим обозначения, относящиеся к индексам.

Пусть нижний индекс k обозначает номер пространственной точки (ячейки), $k=1, 2, \dots, K$. Полуцелые индексы относятся к сторонам ячейки. Верхний индекс v обозначает номер внешней итерации. Верхний индекс n указывает на нижний временной слой сетки. Если верхний индекс отсутствует, то считается, что величина относится к верхнему временному слою.

Для одномерного уравнения теплопроводности полностью неявная разностная схема имеет вид:

$$m_k (E_k - E_k^n) + \tau (W_{k+1/2} - W_{k-1/2}) = 0, \quad W_{k+1/2} = -\frac{\chi_{k+1/2}}{h_{k+1/2}} (T_{k+1} - T_k).$$

Здесь $m_k = \rho_k h_k$ – масса ячейки, h_k – ее размер, $h_{k+1/2} = \frac{1}{2}(h_k + h_{k+1})$, τ – шаг по времени.

После исключения потока тепла получаем уравнение

$$m_k (E_k - E_k^n) - \tau \left[\frac{\chi_{k+1/2}}{h_{k+1/2}} (T_{k+1} - T_k) - \frac{\chi_{k-1/2}}{h_{k-1/2}} (T_k - T_{k-1}) \right] = 0.$$

Линеаризуя по Ньютону уравнение состояния

$$E_k \approx E_k^v + \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_k^v (T_k^{v+1} - T_k^v),$$

приходим к уравнению

$$m_k \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_k^v (T_k^{v+1} - T_k^v) - \tau \left[\frac{\chi_{k+1/2}^v}{h_{k+1/2}} (T_{k+1}^{v+1} - T_k^{v+1}) - \frac{\chi_{k-1/2}^v}{h_{k-1/2}} (T_k^{v+1} - T_{k-1}^{v+1}) \right] = -m_k (E_k^v - E_k^n).$$

Заметим, что коэффициент теплопроводности пересчитывается на первых двух итерациях, а затем фиксируется [5]. Таким образом, метод Ньютона в чистом виде работает, начиная с третьей итерации.

Введем обозначение для приращения температуры на итерациях:

$$\delta T_k^v = T_k^{v+1} - T_k^v.$$

Вычитая и прибавляя в квадратной скобке температуру с v -ой итерации и переходя к приращениям температуры, получаем запись разностного уравнения теплопроводности в дельта-форме:

$$\begin{aligned} & m_k \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_k^v \delta T_k^v - \tau \left[\frac{\chi_{k+1/2}^v}{h_{k+1/2}} (\delta T_{k+1}^v - \delta T_k^v) - \frac{\chi_{k-1/2}^v}{h_{k-1/2}} (\delta T_k^v - \delta T_{k-1}^v) \right] = \\ & = -m_k (E_k^v - E_k^n) + \tau \left[\frac{\chi_{k+1/2}^v}{h_{k+1/2}} (T_{k+1}^v - T_k^v) - \frac{\chi_{k-1/2}^v}{h_{k-1/2}} (T_k^v - T_{k-1}^v) \right], \quad k = 1, 2, \dots, K. \end{aligned}$$

Обозначим вектор неизвестных через z : $z^v = (\delta T_1^v, \dots, \delta T_K^v)$. Систему линейных уравнений можно записать в матричной форме

$$A^v z^v = b^v,$$

$$\text{где } A^v z^v = \left\{ m_k \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_k^v \delta T_k^v - \tau \left[\frac{\chi_{k+1/2}^v}{h_{k+1/2}} (\delta T_{k+1}^v - \delta T_k^v) - \frac{\chi_{k-1/2}^v}{h_{k-1/2}} (\delta T_k^v - \delta T_{k-1}^v) \right] \right\},$$

$$b^v = \left\{ -m_k (E_k^v - E_k^n) + \tau \left[\frac{\chi_{k+1/2}^v}{h_{k+1/2}} (T_{k+1}^v - T_k^v) - \frac{\chi_{k-1/2}^v}{h_{k-1/2}} (T_k^v - T_{k-1}^v) \right] \right\}.$$

В фигурных скобках стоят компоненты векторов $A^v z^v$ и b^v , ($k = 1, 2, \dots, K$).

Остановимся на проблеме согласования линейных итераций с нелинейными. Проверка окончания внешних итераций (итераций по нелинейности) осуществляется по температуре. Процесс завершается при выполнении условия

$$|T_k^{v+1} - T_k^v| \leq \varepsilon_r |T_k^v| + \varepsilon_a. \quad (7)$$

Заметим, что для внутренних итераций, которые необходимы для решения линейной системы, итерационный индекс не вводится. Итерации ведутся до выполнения условия

$$\|b^v - A^v z^v\| \leq \eta^v \|b^v\|.$$

Это условие совпадает с условием (4) завершения линейных итераций неточного метода Ньютона.

Обозначим норму невязки нелинейной системы через

$$\varepsilon^v = \|b^v\| \equiv \|F(x_k)\|,$$

а норму невязки линейной системы через

$$\delta^v = \|b^v - A^v z^v\|.$$

Тогда критерий (5) для выбора управляющего параметра η можно представить в виде:

$$\eta = \left| \frac{\varepsilon^v}{\varepsilon^{v-1}} - \eta^{v-1} \right|. \quad (8)$$

В критерии (6) константы выберем в соответствии с рекомендациями Кэрл Вудвард [4], а также результатами численных исследований, приведенных в работе [3]:

$$\eta = 0,9 \left(\frac{\varepsilon^v}{\varepsilon^{v-1}} \right)^2. \quad (9)$$

Заметим, что значение $\alpha = 2$ теоретически дает q – квадратичную сходимость [3].

4. Тестовые расчеты

Алгоритмы, описанные в предыдущем разделе, были реализованы в программе MPC, предназначенной для решения двумерных и трехмерных задач газовой динамики с теплопроводностью. Расчетная методика (Method of Particle-in-Cell) основана на методе частиц Харлоу [6] и включает в себя эйлеров и лагранжевы этапы. На первом (эйлеровом) этапе определяются изменения параметров среды за счет сил давления и теплопроводности. Моделирование на данном этапе осуществляется на адаптивно-встраиваемой сетке [7] (рис.1). На следующем (лагранжевом) этапе посредством модели частиц осуществляется конвективный перенос, учитывающий обмен массой, импульсом и энергией.

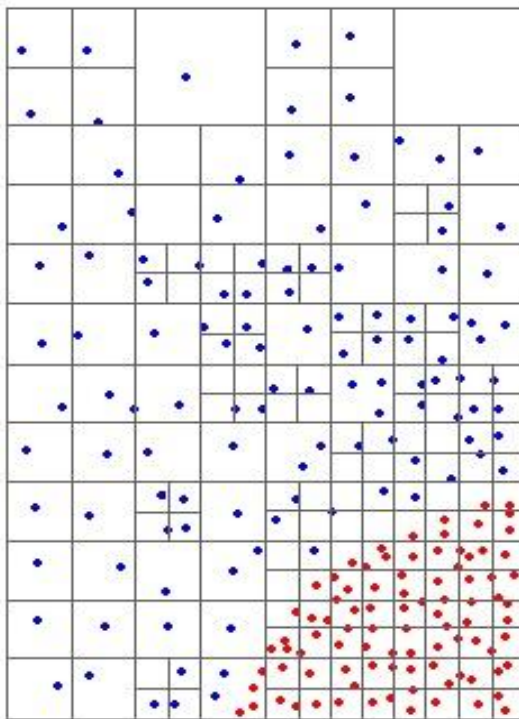


Рис. 1. Пример адаптивно-встраиваемой сетки

На эйлеровом этапе решение уравнения теплопроводности осуществляется по неявной разностной схеме. Ранее в программе MPC была создана подпрограмма решения разностного уравнения теплопроводности относительно температуры (*подпрограмма T*), в ходе настоящей работы было реализовано решение уравнения относительно поправок к температурам (*подпрограмма δT*).

Ниже представлено сравнение итерационных характеристик двух расчетов. В качестве критерия завершения внешних итераций по нелинейности использовался критерий сходимости по температуре (7) при $\varepsilon_r = 10^{-4}$ и 10^{-8} .

При практической реализации вариантов выбора относительной погрешности η использовалась формула:

$$\eta = \max \left\{ \min \left(\frac{\varepsilon_{abs}}{\varepsilon^v}, 0,1 \right), \min(\tilde{\eta}, 0,05) \right\}, \text{ при } \varepsilon_{abs} = 10^{-12},$$

где $\tilde{\eta}$ выбирается по одному из критериев (8) или (9). Аналогичная формула применялась Бондаренко Ю. А., Горбуновым А. А., Бабановым А. В. (ВНИИЭФ, неопубликованная работа).

Решение линеаризованной системы уравнений выполнялось с использованием библиотеки PMLP/ParSol комплекса LParSol [8], в которой в качестве решателя применялся метод сопряженных градиентов, в качестве предобуславливателя – блочный Якоби.

Расчеты проводились на ПЭВМ со следующими характеристиками: Intel® Core™ i7 CPU 870 @ 2.93GHz, 15.9 GBofRAM.

Представленные ниже результаты расчетов получены по двумерному варианту программы MPC.

4.1. Тестовый расчет 1

Рассматривается задача о разлете в вакуум сферически-симметричной многослойной системы с таблично заданными источниками энергии.

Количество ячеек базовой сетки задано равным 350×150 , число частиц задано равным 727966, среднее число адаптивных ячеек ~ 70000 .

В табл. 1 представлены результаты расчетов по двум версиям программ с различными критериями и заданными точностями. Максимальное отклонение средних температур в расчетах 1.2–1.7 от средних температур расчета 1.1 не превышает 0,05 %.

Таблица 1

Сравнение времени счета, количества линейных и нелинейных итераций

Номер расчета	Подпрограмма, точность, критерий	Время счета	Процент счета решателя	Число линейных итераций	Число нелинейных итераций	Число временных шагов
1.1	$T, \eta_k = 10^{-10}, k = 1, 2, \dots$	4 ч 44 мин	55,19 %	108957	43794	7281
1.2	$T, \eta_k = 10^{-8}, k = 1, 2, \dots$	4 ч 26 мин	52,81 %	73177	41244	7250
1.3	$\delta T, \eta_k = 10^{-8}, k = 1, 2, \dots$	5 ч 21 мин	57,4 %	215482	48409	7262
1.4	$\delta T, \eta_1 = 10^{-8},$ критерий (8)	4ч 45 мин	57,04 %	112725	47915	7247
1.5	$\delta T, \eta_1 = 10^{-5},$ критерий (8)	4 ч 19 мин	54,57 %	71701	47163	7296
1.6	$\delta T, \eta_1 = 10^{-3},$ критерий (8)	3 ч 55 мин	51,8 %	71756	45528	7243
1.7	$\delta T, \eta_1 = 10^{-3},$ критерий (9)	4 ч 1 мин	52,7 %	95728	46307	7304

Из таблицы видно, что число нелинейных итераций во всех расчетах остается приблизительно одинаковым. В расчетах 1.3–1.6 наблюдается уменьшение числа линейных итераций и времени счета задачи. Из расчетов 1.6 и 1.7, в которых варьировался критерий связи линейных и нелинейных точностей, видно, что в расчете с критерием (9) на 33 % больше линейных итераций, чем в расчете с критерием (8). Следует отметить, что расчеты 1.4 и 1.5 с критерием (9) не представлены ввиду того, что при проведении счета число нелинейных итераций на шаге многократно увеличивается и не всегда удается сойтись за разумное число итераций по нелинейности. Заметим, что расчет 1.6 по программе решения уравнения теплопроводности в дельта-форме в 1,13 раза быстрее расчета 1.2 по программе решения уравнения теплопроводности относительно температуры.

4.2. Тестовый расчет 2

Рассматривается задача распространения тепловой волны (с учетом газодинамического движения вещества) в сферически-симметричной многослойной системе с нелинейной зависимостью коэффициента теплопроводности от температуры.

Количество ячеек базовой сетки задано равным 800×400 , число частиц равно 1721569, среднее число адаптивных ячеек ~ 370000 .

В табл. 2 представлены результаты расчетов по двум версиям программ с различными критериями и заданными точностями.

Таблица 2

Сравнение времени счета, количества линейных и нелинейных итераций

Номер расчета	Подпрограмма, точность, критерий	Время счета	Процент счета решателя	Число линейных итераций	Число нелинейных итераций	Число временных шагов
2.1	$T, \eta_k = 10^{-10},$ $k = 1, 2, \dots$	11 ч 46 мин	67,28 %	44515	12608	2801
2.2	$T, \eta_k = 10^{-8},$ $k = 1, 2, \dots$	10 ч 36 мин	64,07 %	28733	11713	2823
2.3	$\delta T, \eta_k = 10^{-8},$ $k = 1, 2, \dots$	13 ч 23 мин	68,5 %	83826	13088	2827
2.4	$\delta T, \eta_1 = 10^{-8},$ критерий (8)	10 ч 24 мин	63,92 %	40886	13248	2824
2.5	$\delta T,$ критерий (8)	10 ч 2 мин	63,56 %	33377	12886	2798
2.6	$\delta T, \eta_1 = 10^{-3},$ критерий (8)	9 ч 51 мин	63,7 %	34178	13262	2826
2.7	$\delta T, \eta_1 = 10^{-3},$ критерий (9)	10 ч 16 мин	63,31 %	49135	13723	2828

Из таблицы видно, что число нелинейных итераций во всех расчетах остается приблизительно одинаковым. В расчетах 2.3–2.6 наблюдается уменьшение числа линейных итераций и времени счета задачи. Из расчетов 2.6 и 2.7, в которых варьировался критерий связи линейных и нелинейных точностей, видно, что в расчете с критерием (9) на 44 % больше линейных итераций, чем в расчете с критерием (8). Расчет 2.6 по программе решения уравнения теплопроводности в дельта-форме в 1,1 раз быстрее расчета 2.2 по программе решения уравнения теплопроводности относительно температуры.

5. Выводы

В докладе рассмотрены предназначенные для решения нелинейных систем неточные методы Ньютона, соответствующие двум вариантам выбора управляющих параметров.

В результате проведенного численного исследования установлено, что

– по числу линейных итераций расчеты в дельта-форме хорошо согласуются с теорией неточных методов Ньютона, изложенной в работах [2, 3], при этом снижение начальной точности в критерии (8) приводит к уменьшению числа линейных итераций при практически одинаковом числе нелинейных итераций;

– критерий (8) эффективнее критерия (9), в расчетах с критерием (9) число линейных итераций более чем на 30 % превышает общее число внутренних итераций в расчетах с критерием (8);

– по сравнению с записью разностного уравнения в T -форме расчет в дельта-форме на рассматриваемых тестовых задачах газодинамики с теплопроводностью примерно на 10 % выполняется быстрее.

Литература

1. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М.: Наука, 1987.
2. Dembo R. S., Eisenstat S. C., Steihaug T. Inexact Newton methods // SIAM J. Numer. Anal. 1982. Vol. 19. P. 400–408.
3. Eisenstat S. C., Walker H. F. Choosing the forcing terms an inexact Newton method // SIAM J. SCI. Comput. January 1996. Vol. 17, N 1. P. 16–32.
4. Woodward C. S. SUNDIALS: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers // Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL-PRESS-213978.
5. 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.
6. Харлоу Ф. Н. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики. Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967. С. 316–342.
7. Павленко О. Н., Литвиненко И. А. Моделирование трехмерного течения газа методом частиц на адаптивно-встраиваемой сетке. Расчет задачи о точечном взрыве // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 4. С. 61–67.
8. Бартенев Ю. Г., Бондаренко Ю. А., Ерзунов В. А. и др. Комплекс LParSol для решения СЛАУ // XIII Международ. семинар «Супервычисления и математическое моделирование»: Тез. докл. Саров, 3–7 октября, 2011. С. 34–36.

ТЕХНОЛОГИЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА СЕТКАХ ТИПА «ХИМЕРА» В ПАКЕТЕ ПРОГРАММ ЛОГОС

Ю. Н. Дерюгин, Р. Н. Жучков, Д. К. Зеленский, А. В. Саразов

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

Введение

В «РФЯЦ-ВНИИЭФ» разработан пакет программ ЛОГОС [1], предназначенный для решения связанных и сопряженных трехмерных задач теплопереноса и гидродинамики на параллель-