УДК 536.2+539.3

МЕТОД ПЕРЕСЧЕТА ТРЕХМЕРНОГО ПОЛЯ ТЕМПЕРАТУР ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПРОЧНОСТИ

В. И. Романов, Е. Е. Маслов, С. Ю. Гулаков
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Часто при проведении расчетных исследований прочности возникает необходимость учитывать неравномерные тепловые поля, в условиях которых происходит деформирование. Целью работы является описание метода передачи информации о пространственном распределении температуры в расчетную прочностную модель конструкции. На языке программирования Python реализована процедура интерполирования температуры в узлы конечно-элементной сетки для решения задач прочности по известным значениям температуры в точках упорядоченного множества, являющихся, например, узлами или центрами ячеек сетки для решения тепловой задачи. Процедура основывается на решении задачи о поиске нескольких ближайших соседей. Для осуществления эффективного поиска информация о точках-узлах интерполирования представлена в виде октодерева. В произвольной пространственной точке неизвестное значение температуры восстанавливается по известным значениям в точках-соседях с помощью пространственной линейной интерполяции, основанной на использовании метода наименьших квадратов.

Приводятся результаты тестирования описываемого метода на модельной задаче. Показана высокая точность интерполирования. Описанный метод успешно применяется авторами для учета теплового состояния транспортных упаковочных комплектов, предназначенных для перевозки и хранения отработавшего ядерного топлива, при обосновании их безопасности. Намечены направления дальнейшего развития метода.

Ключевые слова: множество точек, задача о поиске ближайшего соседа, октодерево, интерполяция, метод наименьших квадратов.

Введение

В связи с постоянным развитием вычислительной техники и программных комплексов все чаще в расчетной практике используются большие сложные модели, которые без особых упрощений учитывают мелкие детали конструкций и нюансы описываемых процессов. Минимизация упрощений позволяет уйти от излишнего консерватизма, закладываемого при расчетном обосновании безопасности изделий, что, в конечном итоге, приводит к уменьшению материалоемкости и стоимости конструкций, повышению удобства обращения.

При расчетном обосновании безопасности контейнеров для перевозки отработавшего ядерного топлива одним из шагов к снижению консерватизма является учет трехмерного распределения температуры в прочностной задаче и соответствующее изменение механических свойств материалов. Также учет теплового поля позволяет проследить эволюцию зазоров при температурном расширении элементов конструкции и точно определить их контактирующие поверхности в разогретом состоянии, что может повлиять на пространственное распределение температуры и снизить консерватизм уже в тепловой задаче.

Поле температур определяется по результатам исследований теплового состояния конструкции и представляет собой таблицу с координатами точек и соответствующими им значениями температур. Для тепловой и прочностной задач счетные сетки, покрывающие одну и ту же конструкцию, не совпадают, так как основываются на ячейках разной топологии. Ячейки *тепловой сетки* являются произвольными многогранниками. В *прочностной сетке* могут использоваться четырех-, шести-, восьмиузловые объемные конечные элементы (гексаэдры, пентаэдры и тетраэдры) и трех-, четырех-, восьмиузловые — оболочечные. Сетка для тепловой задачи является более подробной по сравнению с прочностной. В настоящее время тепловое состояние контейнеров может исследоваться на сетке, состоящей из нескольких десятков миллионов ячеек. Прочностная сетка для той же конструкции обладает на порядок меньшим числом конечных элементов — несколько миллионов — из-за более сложной системы решаемых дифференциальных уравнений, большего числа неизвестных. Поэтому возникает необходимость создания метода, который позволяет без упрощений пересчитать трехмерное температурное поле, полученное на тепловой сетке, на сетку для решения прочностных задач. Инструментом для реализации такого метода авторами выбран свободно распространяемый язык программирования Python.

Суть метода заключается в следующем. В первую очередь необходимо убедиться, что тепловая и прочностная сетки совмещены в пространстве. Затем для каждого узла конечно-элементной прочностной сетки определяется ближайшая точка (или ближайший набор точек) тепловой сетки. Для *прочностной точки* значение температуры устанавливается то же, что в найденной ближайшей *тепловой точке*, или находится интерполяцией по значениям для найденного набора ближайших тепловых точек. Таким образом, задача о пересчете поля температур сводится к задаче о нахождении ближайших соседей и к трехмерной интерполяции по найденному набору точек.

Постановка задачи и подход к ее решению

Пусть в трехмерном пространстве имеется упорядоченное множество точек Q, для которых известны значения температуры. Необходимо получить неизвестное значение температуры в произвольной точке $\mathbf{p}$, являющейся, например, узлом конечно-элементной сетки для решения задачи прочности. Для этого необходимо определить для точки $\mathbf{p}$ ближайшую точку из множества точек Q или набор из нескольких ближайших точек.

Самым простейшим способом нахождения ближайших соседей является метод прямого поиска. Согласно этому методу для точки $\mathbf{p}$ следует вычислить расстояние до всех точек $\mathbf{q}_i$ и выбрать из них такую, для которой оно минимально. В случае, когда количество точек во множестве Q составляет несколько десятков миллионов и подобный поисковый запрос необходимо выполнить миллионы раз, время выполнения данной процедуры становится несоизмеримым со сроками выполнения расчетных исследований. Поэтому целесообразно расположить информацию о точках множества Q в соответствии с некоторой структурой данных, облегчающей поиск. Такие структуры позволяют не рассматривать в качестве ближайших соседей заведомо далекие точки.

Существует несколько видов подобных структур данных, таких как Z-кривые, kd-деревья или двоичные деревья поиска, R-деревья, деревья покрытий [1—4]. В настоящей статье описывается способ поиска, основанный на использовании октодерева, каждый внутренний узел которого имеет ровно восемь потомков.

Структура октодерева

Узел дерева содержит информацию о некоторой пространственной области в форме прямоугольного параллелепипеда (*кодирует* эту область). В данном случае это минимальные и максимальные координаты вершин параллелепипеда или минимальные координаты вершин и длина ребра, если это куб. С точки зрения экономии оперативной памяти, кубические области предпочтительнее: тогда вместо шести чисел можно хранить только четыре. Далее будет рассматриваться именно этот случай.

Узел хранит признак того, является он крайним или нет. Крайним узлом, или листом, называется узел дерева, не имеющий потомков. Признаком того, что узел дерева является листом, служит номер точки из множества Q, находящейся внутри кодируемого им куба. Узел-лист кодирует куб, в котором находится только одна точка множества Q. В случае, если узел не является листом, значение признака полагается равным -1.

Каждый куб, закодированный узлом дерева, делится на восемь частей плоскостями, проходящими через его центр и параллельными его граням. Порядок нумерации октантов куба для всех узлов дерева принимается единым. Полученные восемь октантов кодируются дочерними узлами, принадлежащими следующему, большему уровню дерева. Поэтому в узле должен храниться список из восьми номеров его дочерних узлов. Если в списке дочерних узлов вместо положительного номера указывается -1, это означает, что в соответствующем октанте не содержится ни одной точки множества Q, он пуст и потомков в этом направлении нет.

Пример октодерева, опирающегося на множество из четырех точек, представлен на рис. 1.

Создание дерева

Создание октодерева начинается с корневого узла. В качестве кодируемого им куба определяется габаритный куб, охватывающий все множество пространственных точек Q.

Развитие дерева происходит в результате "заселения" точек $\mathbf{q}_i$ множества Q в кубы, кодируемые узлами дерева. В габаритный куб, кодируемый корневым узлом, заселяется точка $\mathbf{q}_1$, и корневой узел становится листом.

Заселение следующих точек из множества Q в кубы, кодируемые узлами дерева, выполняется в соответствии со следующей рекурсивной процедурой.

Если узел дерева является листом, то его куб делится на восемь октантов и точка, уже находящаяся в кубе текущего узла, вытесняется в новый узел с уровнем на единицу больше. Для текущего узла устанавливается признак, что он не является листом, и обновляется список его дочерних узлов. Процедура заселения точки в текущий узел повторяется.

Если узел дерева — не лист, то определяется дочерний узел, в куб которого попадает заселяемая точка. Если такой узел существует, то производится попытка заселить точку в куб этого дочернего узла. Если узла не существует, то строится новый узел дерева на этом же уровне для нового куба, содержащего заселяемую точку.

При заселении новой точки в куб узла-листа можно анализировать расстояние до уже имеющейся там точки и значения температуры. Если различия в расстоянии и температуре небольшие, то можно новую точку не заселять. Тем самым экономится оперативная память, уменьшается количество уровней дерева.

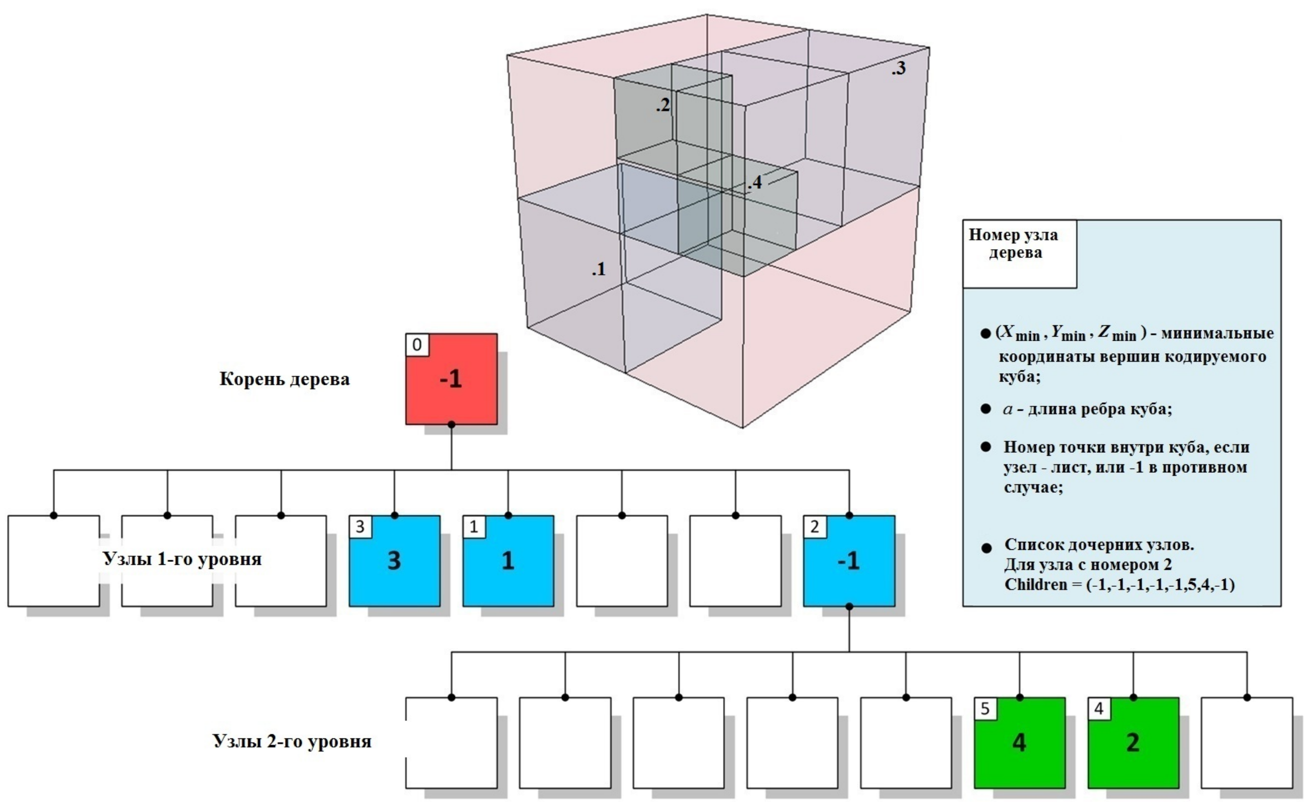

Рис. 1. Пример октодерева и данные, хранимые в узле

Процедура поиска ближайшего соседа

При нахождении ближайшего соседа для произвольной точки $\mathbf{p}$ в первую очередь необходимо пройти по дереву, чтобы определить узел максимального уровня, в куб которого она попадает. Этот узел совсем необязательно будет листом. В таком случае составляется список точек множества Q, попадающих внутрь куба, кодируемого этим узлом. Методом прямого поиска из этого списка определяется точка, ближайшая к $\mathbf{p}$. Так как тепловая и прочностная сетки совмещены в пространстве, то, как правило, список получается короткий и прямой поиск выполняется довольно быстро.

Найденная точка является только кандидатом на звание ближайшей, расстояние от точки $\mathbf{p}$ до точки-кандидата объявляется радиусом поиска. Необходимо еще раз пройти по дереву, начиная от корневого узла и рассматривая те узлы, для которых расстояние от кодируемого куба до точки $\mathbf{p}$ меньше радиуса поиска.

Расстояние между кубом и точкой определяется следующим образом. Если точка находится внутри куба, то расстояние нулевое. В противном случае вычисляется расстояние от точки до ближайшей грани куба.

Если расстояние от точки $\mathbf{p}$ до точки $\mathbf{q}$ из текущего рассматриваемого листа дерева меньше радиуса поиска, то точка $\mathbf{q}$ принимается ближайшей, а значение радиуса поиска обновляется. В результате второго обхода дерева определяется ближайший сосед.

Для поиска нескольких ближайших соседей можно модифицировать описываемую процедуру путем исключения ранее найденных ближайших точек из рассмотрения.

Интерполяция

Для вычисления значения поля в новой точке по известным значениям в нескольких соседних точках авторами используется метод наименьших квадратов [5].

Пусть для точки $\mathbf{p}$ определен набор ближайших точек из множества Q. В окрестности точки $\mathbf{p}$ зависимость поля от координат можно представить в виде разложения в ряд Тейлора и заменить суммой первых двух членов ряда:

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{p}) + (\mathbf{x} - \mathbf{p}) \cdot \nabla f(\mathbf{p}).$$

Будет удобно ввести локальную систему координат с началом в точке $\mathbf{p}$, для которой нужно восстановить неизвестное значение поля. Тогда в новой системе координат для i-й точки из набора соседей формулу можно записать как

$$f_i \approx f + x_i \nabla f_x + y_i \nabla f_y + z_i \nabla f_z,$$

где f_i — известное значение температуры в точке $\mathbf{q}_i$ с координатами x_i, y_i, z_i в новой локальной системе координат с началом в точке $\mathbf{p}$; f — неизвестное значение температуры в точке $\mathbf{p}$, которое нужно восстановить; ∇f_x, ∇f_y, ∇f_z — неизвестные значения координат вектора градиента поля.

Неизвестные значения температуры и компонент градиента определяются из условия, что для всего набора соседей сумма квадратов невязок должна принять минимальное значение:

$$\sum_{i=1}^{n} (f_i - f - x_i \nabla f_x - y_i \nabla f_y - z_i \nabla f_z)^2 \xrightarrow{f, \nabla f} \min$$

(n — количество точек-соседей). Минимизация приведенного функционала сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ с матрицей

$$A = \begin{pmatrix} n & \sum\limits_i x_i & \sum\limits_i y_i & \sum\limits_i z_i \\ \sum\limits_i x_i & \sum\limits_i x_i x_i & \sum\limits_i x_i y_i & \sum\limits_i x_i z_i \\ \sum\limits_i y_i & \sum\limits_i y_i x_i & \sum\limits_i y_i y_i & \sum\limits_i y_i z_i \\ \sum\limits_i z_i & \sum\limits_i z_i x_i & \sum\limits_i z_i y_i & \sum\limits_i z_i z_i \end{pmatrix},$$

вектором неизвестных переменных

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} f, & \nabla f_x, & \nabla f_y, & \nabla f_z \end{pmatrix}^T$$

и вектором правой части

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \sum\limits_i f_i, & \sum\limits_i f_i x_i, & \sum\limits_i f_i y_i, & \sum\limits_i f_i z_i \end{pmatrix}^T.$$

Такой метод удобен, так как заранее неизвестно, сколько будет соседей в окрестности точки интерполирования, и точки-соседи могут располагаться хаотично, не в узлах регулярной сетки, удобной для лагранжевой интерполяции.

Вид матрицы A также "подсказывает" стратегию поиска ближайших соседей. Для решения системы необходимо, чтобы определитель матрицы отличался от нуля. Численные эксперименты показывают, что определитель такой матрицы принимает ненулевые значения в случае, если точки $\boldsymbol{q}_i$ не лежат вблизи какой-либо плоскости или прямой. Поэтому искать ближайших соседей необходимо до тех пор, пока определитель системы не примет достаточно большое значение. Набор ближайших соседей должен содержать как минимум четыре точки.

Тестирование метода

Для демонстрации применимости предлагаемого метода пересчета рассматривается распределение температуры в стенках однородной трубы. Тепловое поле в данном случае обладает осевой симметрией и не зависит от осевой и угловой координат. Зависимость температуры от радиуса является нелинейной и имеет следующий вид [6]:

$$T(r) = T_1 - \frac{T_1 - T_2}{\ln \dfrac{R_2}{R_1}} \ln \frac{r}{R_1}, \tag{1}$$

где $T_1 = 0$, $T_2 = 400\,^\circ\mathrm{C}$ — значения температуры на внутренней и внешней поверхностях трубы соответственно; $R_1 = 300$ мм, $R_2 = 600$ мм — внутренний и внешний радиусы.

Подготовлены две сетки, покрывающие один и тот же фрагмент трубы. Первая сетка — регулярная опорная, для которой узловые значения температуры определены по формуле (1) (рис. 2). Вторая сетка — произвольная тетраэдрическая (рис. 3, *а*), для которой значения поля в узлах определяются с помощью интерполяции.

На рис. 3, *б* представлено поле температур во фрагменте трубы, получаемое не интерполированием, а переносом значений температуры в узлы произвольной сетки из ближайших узлов опорной сетки. Видно, что поле имеет негладкий характер, заметно отличающийся от действительного. В случае использования процедуры интерполирования (рис. 3, *в*) распределение температуры совпадает с заданным. Анализ различий показывает, что максимальная разница между значениями, получаемыми с помощью интерполяции, и аналитическими значениями составляет 9 °C, или 2,25 %.

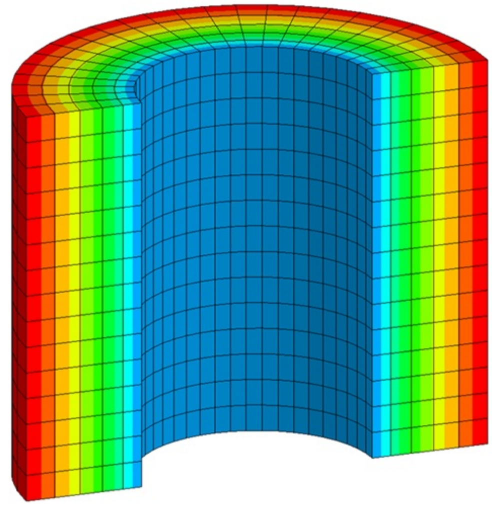

Рис. 2. Опорная сетка и тепловое поле

Применение

Представленный метод пересчета трехмерного поля температур успешно применяется в расчетной практике. Один из результатов применения метода показан на рис. 4. На данном рисунке для транспортного упаковочного комплекта ТУК [7], разработанного

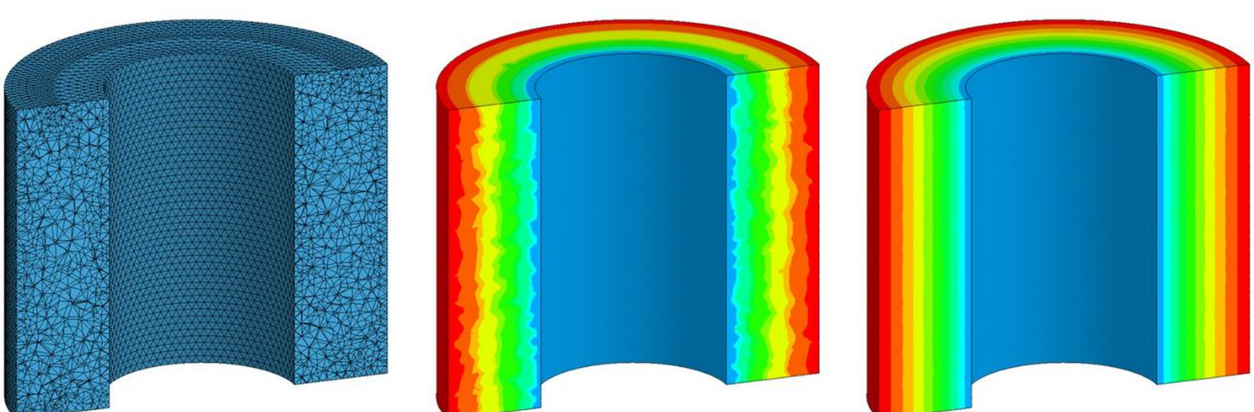

Рис. 3. Произвольная тетраэдрическая сетка (*а*) и поля температур, полученные переносом значений из узлов опорной сетки (*б*) и в результате интерполяции (*в*)

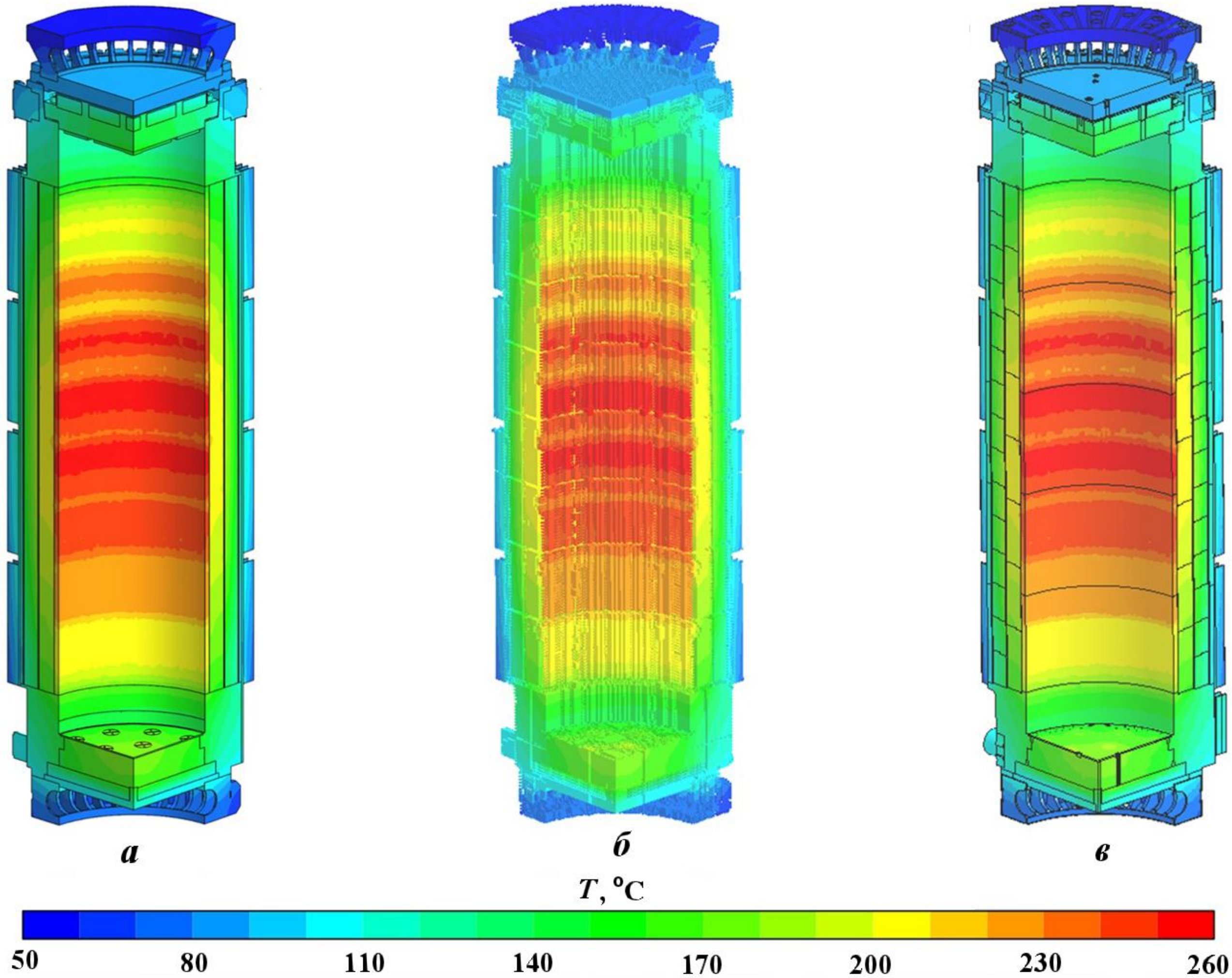

Рис. 4. Распределение температуры в расчетных моделях ТУК: *а* — для тепловых расчетов; *б* — в листьях октодерева; *в* — для прочностных расчетов

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ" и предназначенного для перевозки отработавшего ядерного топлива, показаны поля температур, полученные в результате расчетов тепловых задач и после пересчета на конечно-элементную сетку для прочностных задач. Сеточная модель контейнера для тепловых задач содержит примерно 36 млн ячеек, для прочностных — около 9 млн узлов конечно-элементной сетки. Время выполнения процедуры пересчета теплового поля составляет 1 час.

На рис. 5, 6 показаны укрупненные фрагменты сеточных моделей, из которых видно, что изолинии сгенерированного теплового поля для прочностной задачи распределены идентично их распределению для тепловой задачи.

Дальнейшее развитие метода

Тепловые и прочностные точки упорядочены в пространстве как узлы расчетных сеток. Поэтому имеется возможность получения информации о близости узлов внутри модели через кодировку конечных элементов. Возможно, использование такой дополнительной информации позволит еще больше ускорить передачу тепловых полей в прочностные задачи.

Также видится возможным ускорение процесса пересчета путем использования распараллеливания. Узлы прочностной сетки можно разделить на несколько групп, для каждой из которых запускается свой процесс интерполяции на отдельном ядре процессора.

После получения поля температур в узлах прочностной сетки, возможно, стоит приме-

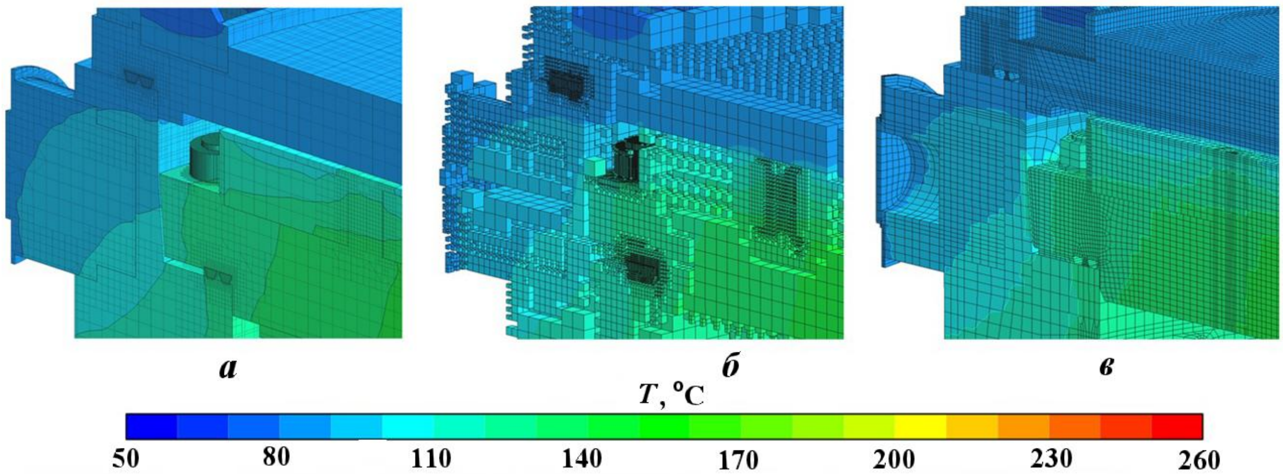

Рис. 5. Поле температур в верхней части контейнера: *а* — для тепловых расчетов; *б* — в листьях октодерева; *в* — для прочностных расчетов

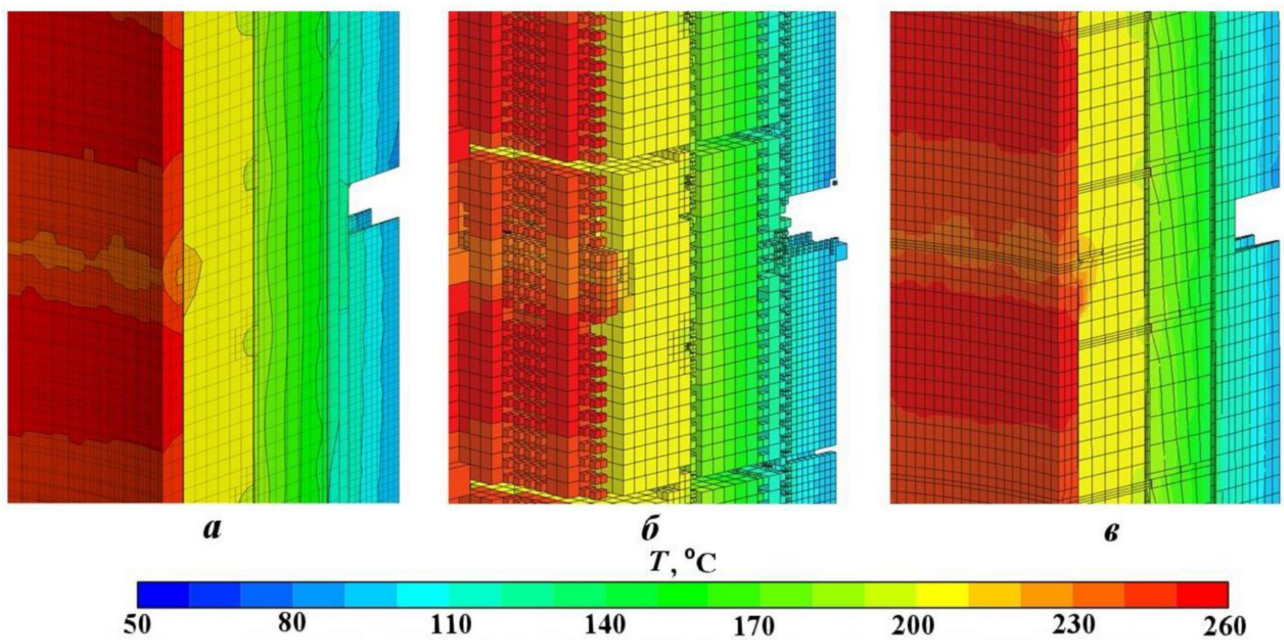

Рис. 6. Поле температур в центральной части контейнера: *а* — для тепловых расчетов; *б* — в листьях октодерева; *в* — для прочностных расчетов

нить сглаживание, например, на основе анализа градиентов температур в каждом конечном элементе.

Список литературы

1. *Препарата Ф., Шеймос М.* Вычислительная геометрия. Введение: Пер. с англ. М.: Мир, 1989.
   Preparata F., Sheymos M. Vychislitelnaya geometriya. Vvedenie: Per. s angl. M.: Mir, 1989.
2. *Beygelzimer A., Kakade S., Langford J.* Cover trees for nearest neighbor. http://hunch.net/~jl/projects/cover_tree.
3. *Bentley J. L.* Multidimensional binary search trees used for associative searching // Communications of the ACM. 1975. Vol. 18. P. 509—517.
4. *Dobkin D., Lipton R. J.* Multidimensional searching problems // SIAM J. Comp. 1976. Vol. 5(2). P. 181—186.

5. *Линник Ю. В.* Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической теории обработки наблюдений. 2-е изд. М.: Физматгиз, 1962.
   Linnik Yu. V. Metod naimenshikh kvadratov i osnovy matematiko-statisticheskoy teorii obrabotki nablyudeniy. 2-e izd. M.: Fizmatgiz, 1962.
6. *Цветков Ф. Ф., Григорьев Б. А.* Тепломассобмен: Учеб. пособие для вузов. 2-е изд., испр. и доп. М.: Изд-во МЭИ, 2005.
   Tsvetkov F. F., Grigoryev B. A. Teplomassoobmen: Ucheb. зosobie dlya vuzov. 2-e izd., ispr. i dop. M.: Izd-vo MEI, 2005.
7. Патент на изобретение № 2746959 РФ, МПК G21F 5/00, G21F 5/008. Контейнер для транспортирования и хранения отработавшего ядерного топлива / Л. Н. Кожаев, И. А. Барченков, С. В. Леонтьев, Д. Ю. Смирнов, В. И. Кечин, Е. Г. Куделькин, В. И. Романов, Ю. А. Вяткин, Е. Е. Маслов, Д. А. Варавин, А. В. Виноградов. 22.04.2021. Бюллетень № 12.
   Patent na izobretenie № 2746959 RF, MPK G21F 5/00, G21F 5/008. Konteyner dlya transportirovaniya i khraneniya otrabotavshego yadernogo topliva / L. N. Kozhayev, I. A. Barchenkov, S. V. Leontyev, D. Yu. Smirnov, V. I. Kechin, E. G. Kudelkin, V. I. Romanov, Yu. A. Vyatkin, E. E. Maslov, D. A. Varavin, A. V. Vinogradov. 22.04.2021. Byulleten № 12.

Статья поступила в редакцию 23.06.2021.