

УДК 519.6

МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА НЕРЕГУЛЯРНЫХ СЕТКАХ В ПАРАЛЛЕЛЬНОМ РЕЖИМЕ В МЕТОДИКЕ МЕДУЗА

А. А. Горбунов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Представлены метод и программа расчета двумерного уравнения лучистой теплопроводности на нерегулярной многоугольной сетке, используемые в методике МЕДУЗА. Для аппроксимации уравнения теплопроводности применяется полностью неявная разностная схема. Границы раздела сред моделируются при помощи *смешанных* ячеек, которые рассчитываются с использованием механизма выделения контактной границы.

В программе расчета процесса теплопроводности применяется версия библиотеки линейных решателей PMLP, позволяющая проводить расчеты в параллельном режиме. Применимость программы продемонстрирована на примере расчетов трех тестовых задач.

Введение

Методика МЕДУЗА [1] предназначена для расчета двумерных задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках в лагранжевых координатах. В методике предусмотрен расчет процессов газовой динамики, лучистой теплопроводности, детонации и упругопластики. Для аппроксимации разностных уравнений реализована центрированная разностная схема — все расчетные величины отнесены к узлам триангуляционной сетки [1]. Во избежание перехлестов сетки при проведении расчетов включаются механизмы ее корректировки — раздвижки, перестройки, добавление и удаление ячеек. Структура данных — списковая.

В методике МЕДУЗА используется метод расщепления по процессам. Для расчета процесса газовой динамики применяется явная разностная схема [1], для расчета процесса теплопроводности — полностью неявная разностная схема.

В статье представлены метод расчета процесса теплопроводности и реализующая его программа, которая в настоящее время применяется при расчетах по методике МЕДУЗА и существенно отличается от использовавшейся ранее [2]. Цель новой разработки — повышение точности и скорости счета задач.

Основные особенности предлагаемого метода:

1. Применение расширенного по сравнению с программой [2] шаблона при расчете производной температуры по нормали к стороне ячейки интегрирования.
2. Расчет коэффициента теплопроводности на стороне ячейки интегрирования при помощи улучшенного полугармонического усреднения.
3. Расчет смешанных ячеек с использованием механизма выделения контактной границы (КГ).
4. Использование библиотеки итерационных решателей линейных систем PMLP.
5. Возможность проведения расчетов как в скалярном, так и в параллельном режиме.

Применимость программы, реализующей данный метод, продемонстрирована на примере расчетов трех тестовых задач, в том числе на искаженных сетках.

Программа распараллелена с использованием *параллельной версии* библиотеки PMLP, приведены оценки эффективности распараллеливания одной из тестовых задач.

Конечно-разностная схема для уравнения теплопроводности

Рассмотрим уравнение теплопроводности

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

где ρ — плотность; $E = E(\rho, T)$ — удельная внутренняя энергия; $\varkappa = \varkappa(\rho, T)$ — коэффициент теплопроводности; T — температура.

Для аппроксимации уравнения (1) в двумерном случае при помощи интегроинтерполяционного метода строится неявная разностная схема. Система нелинейных уравнений решается итерационным методом.

На рис. 1 изображена ячейка с номером I и ее ближайшие соседи, называемые соседями первого порядка. Запишем формулу итерационного процесса для ячейки с номером I :

$$\frac{E_I^\nu + \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_I (T_I^{\nu+1} - T_I^\nu) - E_I^n}{\Delta t} = \frac{1}{M_I} \sum_{j=1}^{n_I} L_{II_j} \varkappa_{II_j}^\nu \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{N}} \right)_{II_j}^{\nu+1}. \quad (2)$$

Здесь E — удельная внутренняя энергия; T — температура; Δt — шаг по времени; M_I — масса ячейки с номером I ; n_I — число соседей ячейки с номером I (число соседей первого порядка); L_{II_j} — длина стороны контура интегрирования между ячейками с номерами I и I_j в плоском случае (в осесимметричном случае — площадь поверхности вращения); \varkappa_{II_j} — коэффициент теплопроводности на стороне ячейки интегрирования; \mathbf{N} — срединная нормаль к этой стороне; ν — номер итерации по нелинейности уравнения состояния и коэффициента теплопроводности.

Далее будут описаны способы расчета:

- производной температуры по нормали;
- коэффициента теплопроводности на границе ячеек при помощи улучшенного полугармонического усреднения;
- границы раздела сред,

а также описаны особенности модуля расчета уравнения теплопроводности с использованием библиотеки линейных решателей.

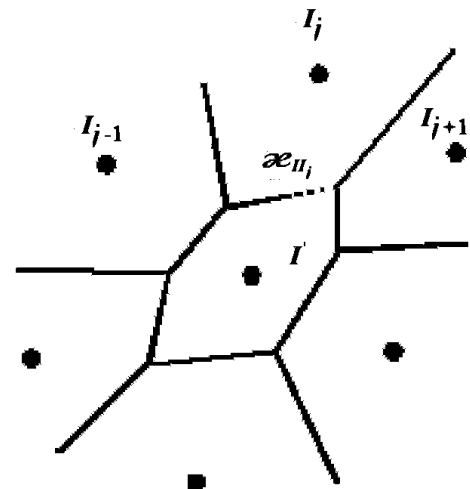


Рис. 1. Фрагмент сетки

Расчет производной температуры по нормали к стороне ячейки интегрирования с использованием расширенного шаблона

Приведем формулы, применяемые для расчета $\frac{\partial T}{\partial \mathbf{N}}$ (производной температуры по нормали к стороне ячейки интегрирования). Рассмотрим рис. 2. Здесь I — номер ячейки интегрирования; 11 и 22 — узлы ее стороны; 1, 2, 3, 4 — центры ячеек интегрирования, окружающих сторону 11—22; \mathbf{N} — срединная нормаль к этой стороне; φ — угол наклона срединной нормали к оси OX . Пунктиром изображен четырехугольник, образованный центрами ячеек интегрирования, окружающих сторону 11—22.

Разложим производную температуры по нормали на две составляющие:

$$\frac{\partial T(X, Y)}{\partial \mathbf{N}} = \frac{\partial T}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial \mathbf{N}} + \frac{\partial T}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial \mathbf{N}} = \frac{\partial T}{\partial X} \cos \varphi + \frac{\partial T}{\partial Y} \sin \varphi.$$

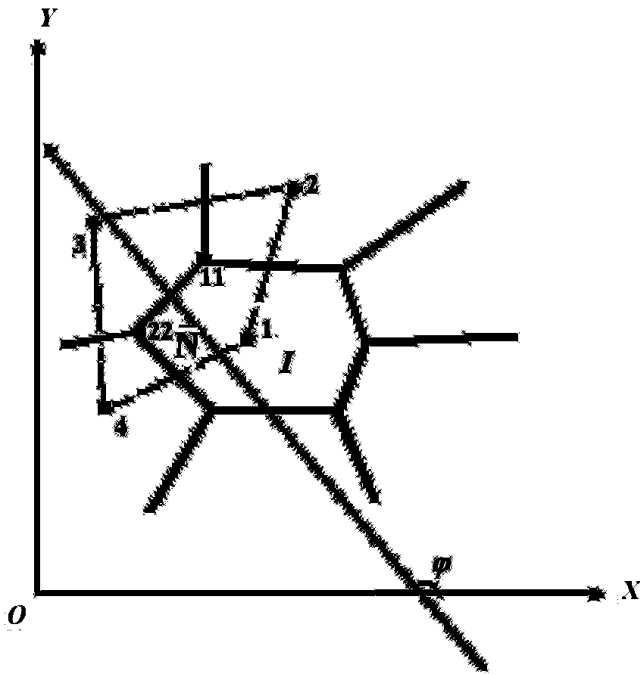


Рис. 2. Расчет производной температуры по нормали к стороне ячейки интегрирования

Частные производные по X и Y аппроксимируем по контуру 1—4 следующим образом:

$$\frac{\partial T}{\partial X} \approx \frac{1}{S} \oint_{1-4} T dY; \quad \frac{\partial T}{\partial Y} \approx -\frac{1}{S} \oint_{1-4} T dX,$$

где S — площадь четырехугольника 1—4.

Полагая, что на каждой стороне четырехугольника 1—4 температура постоянна и равна полусумме температур в узлах на концах этой стороны, получаем следующие формулы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial X} &\approx \frac{1}{2S} \sum_{j=1}^4 T_j (Y_{j+1} - Y_{j-1}); \\ \frac{\partial T}{\partial Y} &\approx -\frac{1}{2S} \sum_{j=1}^4 T_j (X_{j+1} - X_{j-1}). \end{aligned} \quad (3)$$

В методике МЕДУЗА координаты каждого узла ячейки интегрирования определяются как среднее арифметическое координат центров окружающих этот узел ячеек, т. е. для ситуации, изображенной на рис. 2,

$$\begin{aligned} X_{11} &= \frac{1}{3} (X_1 + X_2 + X_3); & X_{22} &= \frac{1}{3} (X_1 + X_3 + X_4); \\ Y_{11} &= \frac{1}{3} (Y_1 + Y_2 + Y_3); & Y_{22} &= \frac{1}{3} (Y_1 + Y_3 + Y_4). \end{aligned}$$

Тогда с учетом обозначений $A = Y_{22} - Y_{11}$, $B = X_{11} - X_{22}$ окончательно получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(X, Y)}{\partial \mathbf{N}} &\approx \frac{1}{6S\sqrt{A^2 + B^2}} \left\{ \left[\sum_{j=1}^4 T_j (Y_{j+1} - Y_{j-1}) \right] (Y_4 - Y_2) + \right. \\ &\quad \left. + \left[-\sum_{j=1}^4 T_j (X_{j+1} - X_{j-1}) \right] (X_2 - X_4) \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Формулы (4) применяются при расчете матричных элементов в программе, использующей библиотеку линейных решателей PMLP [3]. Подобный метод расчета производной температуры по нормали к стороне ячейки интегрирования применяется и в некоторых других методиках, например ДМК [4].

Как видно из (3), (4), производная температуры по нормали на итерации с номером $\nu + 1$ по нелинейности уравнения состояния и коэффициента теплопроводности представляется в виде линейной комбинации температур четырех ячеек, окружающих сторону ячейки интегрирования (см. рис. 1, 2):

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{N}} \right)_{II_j}^{\nu+1} = - \left(a_1 T_I^{\nu+1} + a_2 T_{I_{j-1}}^{\nu+1} + a_3 T_{I_j}^{\nu+1} + a_4 T_{I_{j+1}}^{\nu+1} \right).$$

Здесь индекс II_j используется для обозначения стороны, общей для ячеек с номерами I и I_j .

Как показали расчеты, использование метода (3), (4) обеспечивает хорошую точность расчетов на искаженных сетках.

Расчет коэффициента теплопроводности на стороне ячейки интегрирования

Опишем способ расчета коэффициента теплопроводности κ_{IJ} на стороне ячейки интегрирования, называемый улучшенным полугармоническим усреднением [5, 6].

Находим температуру T_0 на стороне ячейки интегрирования (рис. 3). Приравняв потоки слева и справа от границы ячеек, получим равенство для определения T_0 :

$$\kappa_1 (T_1^{\nu-1}, \rho_1) \frac{T_0^{\nu-1} - T_1^{\nu-1}}{N_1} = \kappa_2 (T_2^{\nu-1}, \rho_2) \frac{T_2^{\nu-1} - T_0^{\nu-1}}{N_2}.$$

Здесь N_1, N_2 — длины отрезков срединной нормали: один из концов каждого отрезка лежит на стороне ячейки интегрирования, другой является проекцией на срединную нормаль центра соответствующей ячейки. Индексы 1 и 2 означают принадлежность величин центрам ячеек интегрирования; ν — номер итерации по нелинейности уравнения состояния.

Определив температуру на стороне ячейки интегрирования, используем ее для расчета коэффициента теплопроводности на стороне ячейки интегрирования на итерации с номером ν по нелинейности уравнения состояния и коэффициента теплопроводности, исходя из формулы

$$\frac{N}{\kappa_{IJ}} = \frac{2N_I}{\kappa_I(T_I) + \kappa_I(T_0)} + \frac{2N_J}{\kappa_J(T_J) + \kappa_J(T_0)},$$

где $N = N_I + N_J$. То есть

$$\kappa_{IJ} = \frac{1}{2} \frac{(\kappa_I(T_I) + \kappa_I(T_0)) (\kappa_J(T_J) + \kappa_J(T_0)) (N_I + N_J)}{(\kappa_J(T_J) + \kappa_J(T_0)) N_I + (\kappa_I(T_I) + \kappa_I(T_0)) N_J}.$$

Здесь все температуры берутся с итерации $\nu - 1$.

Как показали тестовые расчеты, использование описанного способа вычисления коэффициента теплопроводности повысило точность расчета границы раздела сред.

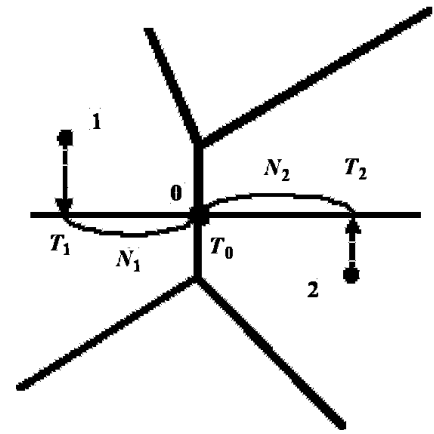


Рис. 3. Расчет температуры на границе ячеек

Расчет смешанных ячеек с использованием механизма выделения КГ

Расчетная сетка методики МЕДУЗА состоит из *чистых* ячеек (содержат одно вещество) и *смешанных* ячеек (содержат несколько веществ), применяющихся для моделирования границы раздела сред. Исторически в МЕДУЗЕ смешанные ячейки рассчитывались по одному из вариантов метода концентраций. При этом в них производились различные осреднения термодинамических величин, основанные на тех или иных физических предположениях. В ряде случаев приходилось прибегать к введению некоторых эмпирических коэффициентов, что при недостатке опыта могло приводить к некорректному описанию физического процесса. Кроме того, при работе механизмов корректировки сетки (программы раздвижки и перестройки) в процессе счета происходило размывание границы раздела сред.

Для улучшения качества расчета границы раздела сред в методике МЕДУЗА был разработан и реализован механизм выделения КГ в смешанных ячейках [7], при котором на этапе расчета начальных данных смешанная ячейка разбивается на чистые подъячейки, рассчитываемые далее как отдельные ячейки. В процессе счета границы раздела сред могут искажаться, и в случае невозможности дальнейшего проведения расчета по причине перехлестов ячеек на всей границе или ее части производится переход на счет по методу концентраций.

Метод выделения КГ в смешанных ячейках применяется при расчете по методике МЕДУЗА всех физических процессов. Разработка алгоритмов и реализация программы расчета процесса газовой динамики и программы интерполяций с использованием механизма выделения КГ выполнены

Р. А. Барабановым под руководством О. И. Бутнева [7]. Разработка алгоритмов и реализация программы расчета процесса лучистой теплопроводности с использованием этого механизма выполнены автором настоящей работы. Метод выделения КГ также используется в программах расчета процесса теплопроводности методик ЭГАК [6] и КОРОНА [8].

Применение метода выделения КГ в смешанных ячейках в модуле расчета процесса теплопроводности методики МЕДУЗА позволило повысить точность расчета потока тепла через границу сильно разнородных сред.

Внедрение библиотеки линейных решателей в модуль расчета процесса теплопроводности

С целью повышения скорости счета и облегчения работы по распараллеливанию программы расчета процесса теплопроводности в модуль расчета процесса теплопроводности методики МЕДУЗА внедрена библиотека линейных решателей PMLP [3]. Приведем формулы расчета матричных элементов и элементов столбца свободных членов.

Введя обозначение $a_k \equiv a_k \Delta l \Delta t \chi_{II_j}^\nu$, $k = 1, \dots, 4$, и с учетом (4) перепишем (2) в следующем виде:

$$M_I \left[E_I^\nu + \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_I (T_I^{\nu+1} - T_I^\nu) - E_I^n \right] = - \sum_{j=1}^{n_I} \left(a_1 T_I^{\nu+1} + a_2 T_{I_{j-1}}^{\nu+1} + a_3 T_{I_j}^{\nu+1} + a_4 T_{I_{j+1}}^{\nu+1} \right)_j.$$

Расчет уравнения теплопроводности на шаге по времени представляет собой итерационный процесс по нелинейности уравнения состояния и коэффициента теплопроводности. На каждой итерации с помощью линейного решателя решается линейная относительно температур система уравнений $AT = B$, матричные элементы и элементы столбца свободных членов которой выглядят следующим образом:

$$A_{ii} = M_i \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_i + \sum_{k=1}^{n_i} a_{1k}; \quad A_{ij} = a_{3ij} + a_{2i(j+1)} + a_{4i(j-1)}, \quad j = 1, \dots, n_i, \quad j \neq i; \quad (5)$$

$$B_i = M_i \left(E_i^n + \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_i T_i^\nu - E_i^\nu \right). \quad (6)$$

Формулы (5), (6) приведены для внутренних ячеек и для подъячеек смешанных ячеек. Для граничных ячеек они аналогичны.

Расчет и занесение матричных элементов и элементов столбца свободных членов выполняются в цикле по всем ячейкам (подъячейкам) сетки.

Элемент матрицы зависит от координат центров и узлов ячеек, шага по времени и коэффициента теплопроводности. На первой итерации по нелинейности уравнения состояния и коэффициента теплопроводности рассчитываются элементы матрицы и заносятся в массивы компоненты матричных элементов, зависящие только от геометрии ячеек и шага по времени. На второй и последующих итерациях компоненты, зависящие только от геометрии и шага по времени, не пересчитываются, а определяются из соответствующих массивов. То есть на второй и последующих итерациях при расчете матричных элементов пересчитываются только элементы главной диагонали матрицы и значения коэффициента теплопроводности.

Занесение элементов осуществляется при помощи функции добавления элемента в матрицу. После решения линейной системы матрица обнуляется.

Поскольку в методике МЕДУЗА используется нерегулярная сетка, в процессе счета число ячеек сетки может меняться. Чтобы не уничтожать и вновь не пересоздавать матрицу и связанные с ней массивы каждый раз при увеличении числа ячеек задачи, изначально матрица и массивы создаются с запасом (примерно 20 %). При этом строки матрицы, соответствующие запасу, нулевые, за исключением единиц на главной диагонали. В том случае, когда запас переполнен (обычно не чаще 1—2 раз в течение всего расчета), матрица и связанные с ней массивы уничтожаются и создаются заново.

Каждой подъячейке смешанной ячейки с КГ соответствует строка в матрице. Итерации по нелинейности уравнения состояния и коэффициента теплопроводности проводятся до сходимости, в том числе и во всех подъячейках смешанных ячеек.

Матрицы, получающиеся при расчетах задач в методике МЕДУЗА, отличаются сложностью и отсутствием четко выраженной блочной структуры, что предъявляет повышенные требования к надежности решателя. На рис. 4 приведены примеры структур таких матриц.

Решатель задается в начале счета. Из большого набора решателей, предоставляемых библиотекой RMLP, выбирается самый надежный, обеспечивающий гарантированное решение самых сложных систем, которые могут быть получены в процессе расчета.

В качестве начального приближения решателю обычно подается массив температур с предыдущей итерации. Для первой итерации в качестве начального приближения подается массив с предыдущего шага по времени, хотя можно подать массив температур, рассчитанный при помощи так называемой предытерации.

Предытерация представляет собой одну итерацию уравнения теплопроводности, в которой коэффициенты правой части разностной схемы рассчитаны на предыдущем шаге по времени:

$$\frac{E_i^0 - E_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{M_i} \sum_{j=1}^{ns} Q_{ij}^n.$$

Здесь i — номер ячейки; E_i^n — удельная внутренняя энергия ячейки, взятая с предыдущего шага по времени; E_i^0 — искомая удельная внутренняя энергия ячейки; Δt — шаг по времени; M_i — масса ячейки; ns — число соседей первого порядка (ближайших соседей) ячейки с номером i .

Определив E_i^0 , с помощью уравнения состояния можно рассчитать искомую температуру на предытерации T_i^0 . Возможно также использование массива температур, полученного на предытерации, для расчета коэффициентов теплопроводности на первой итерации по нелинейности уравнения состояния и коэффициента теплопроводности.

Применение библиотеки линейных решателей в модуле расчета процесса теплопроводности позволило ускорить скорость счета задач и существенно облегчило работы по распараллеливанию программы расчета процесса теплопроводности.



Рис. 4. Структуры матриц, получающихся при расчетах задач по методике МЕДУЗА

Результаты численных расчетов

В данном разделе приводятся результаты расчетов трех тестовых задач, имеющих точное решение, по программе, реализующей предлагаемый метод. Постановки задач и их точные решения взяты из работы [9, 10].

Задача о бегущей тепловой волне. Необходимо рассчитать поле температур внутри бруса, заполненного изначально холодным идеальным газом ($E = T$, $\rho = 1$), с коэффициентом теплопроводности $\kappa = \kappa_0 T^\beta$. Сечение бруса — единичный квадрат.

На одной из внешних границ задано граничное условие

$$T(t)|_{y=0} = \left(\frac{\beta c^2}{\kappa_0} t \right)^{1/\beta}.$$

На трех других границах задано граничное условие типа *жесткая стенка* (поток тепла равен нулю).
Процесс описывается уравнением

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \operatorname{div} (\kappa \operatorname{grad} T).$$

Автомодельное решение задачи имеет следующий вид:

$$T(t, y) = \begin{cases} \left[\frac{\beta c}{\kappa_0} (ct - y) \right]^{1/\beta}, & y < ct; \\ 0, & y \geq ct. \end{cases}$$

Значения параметров следующие: $\kappa_0 = 6$; $\beta = 3$; $c = 4$.

Расчет 1. Расчет проводился на шестиугольной сетке, общий вид которой показан на рис. 5. Граничное условие $T(t)$ задано на прямой $y = 0$. Число ячеек сетки — 2304.

На рис. 6, 7 (см. также цветную вкладку) изображены поле температур и профили температуры в окрестности фронта тепловой волны вдоль лучей $x = 0$, $x = 0,5$, $x = 1$ на момент времени $t = 0,2$.

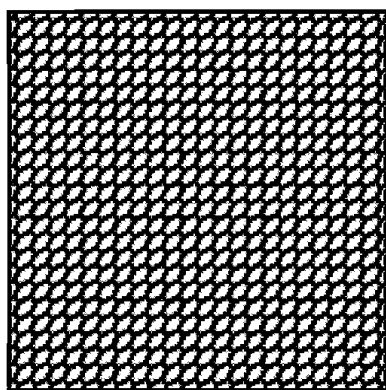


Рис. 5. Задача о бегущей тепловой волне. Шестиугольная расчетная сетка

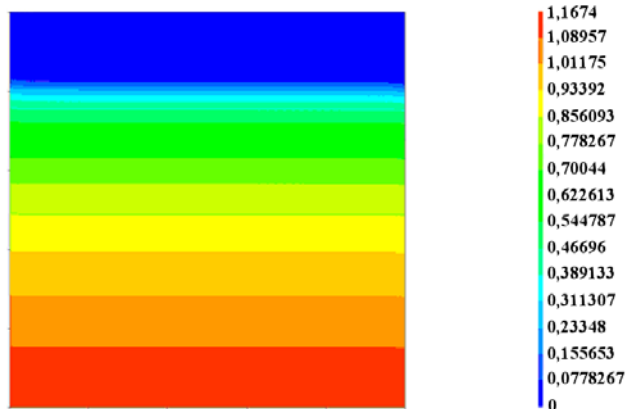


Рис. 6. Задача о бегущей тепловой волне. Поле температур при расчете на шестиугольной сетке, $t = 0,2$

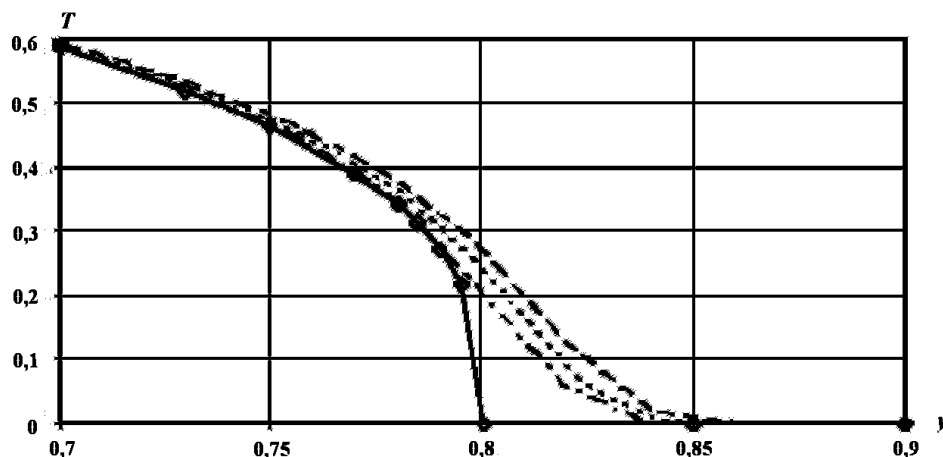


Рис. 7. Расчет на шестиугольной сетке. Профили температуры вдоль трех лучей в окрестности фронта тепловой волны, $t = 0,2$: — — — — $x = 0$; - - - - $x = 0,5$; - · - · - $x = 1$; \diamond — точное решение

Расчет 2. Расчет проводился на сетке типа *паркет*, общий вид которой показан на рис. 8. Граничное условие $T(t)$ задано на прямой $x = 0$. Число ячеек сетки — 2 460.

На рис. 9 (см. также цветную вкладку) изображено поле температур на два момента времени, на рис. 10 (см. также цветную вкладку), 11 — профили температуры вдоль лучей в сравнении с точным решением.

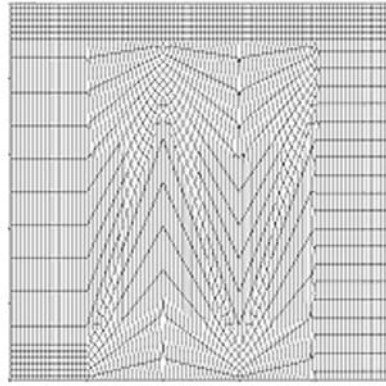


Рис. 8. Задача о бегущей тепловой волне. Расчетная сетка типа *паркет*

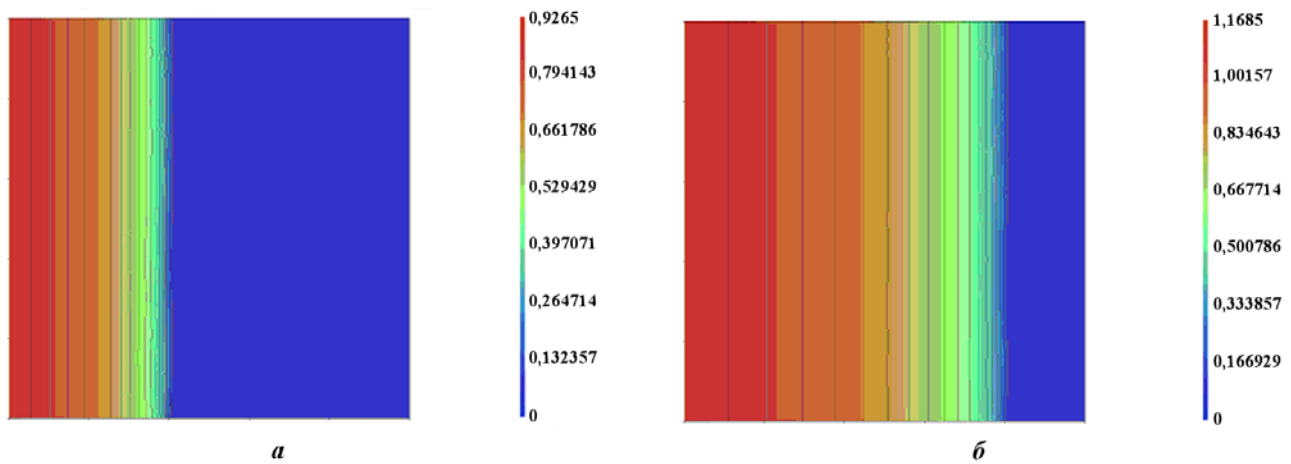


Рис. 9. Задача о бегущей тепловой волне. Поле температур при расчете на сетке типа *паркет*: $a - t = 0,1$; $b - t = 0,2$

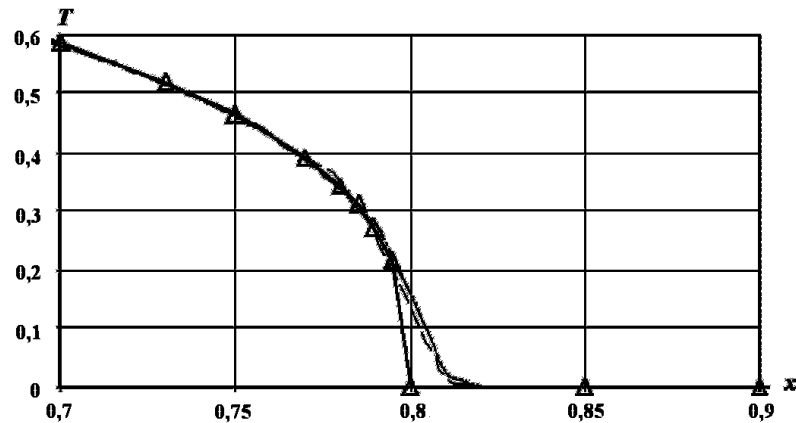


Рис. 10. Расчет на сетке типа *паркет*. Профили температуры вдоль трех лучей в окрестности фронта тепловой волны, $t = 0,2$: — — — — $y = 0$; - - - — $y = 0,5$; — · — — $y = 1$; \triangle — точное решение

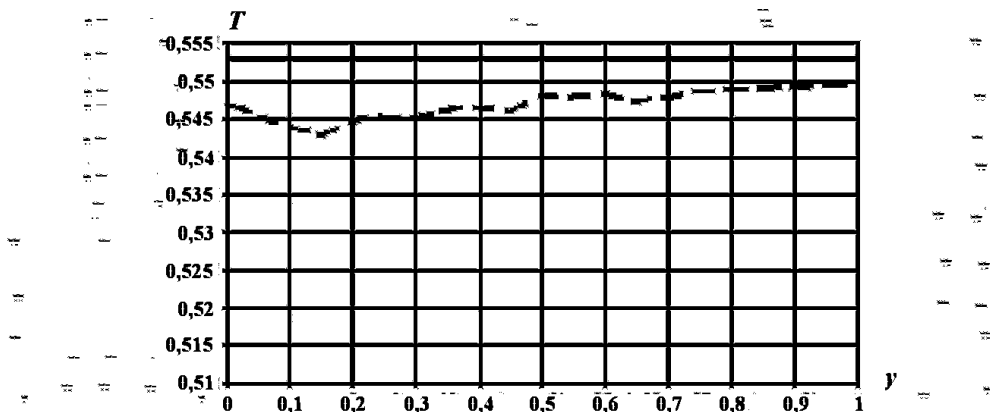


Рис. 11. Расчет на сетке типа *паркет*. Профили температуры вдоль луча $x = 0,7156$, $t = 0,2$: - - - - расчет; — — точное решение

Стационарная двухобластная задача с функцией источника. Шар радиусом $r = 2$ разделен сферой радиусом $r = 1$ на две области, заполненные разными, холодными в начальный момент времени веществами. В области $0 \leq r < 1$ задано постоянное по времени энерговыделение $W = \frac{\partial E}{\partial t} = 6$. Сфера $r = 2$ является *свободной границей*. С течением времени в двухслойной сферической системе устанавливается стационарный тепловой режим с профилем температуры, подлежащим расчету.

Уравнение теплопроводности для данного случая имеет вид

$$\rho_i \frac{\partial E_i}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \kappa_i \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad i = 1, 2;$$

параметры веществ в областях 1 и 2 определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \rho_1 &= 1; \quad E_1 = T; \quad \kappa_1 = \frac{l_1 c}{3} 4\sigma T^3; \quad l_1 = 1,82216 \cdot 10^{-4}; \\ \rho_2 &= 1; \quad E_2 = T; \quad \kappa_2 = \frac{l_2 c}{3} 4\sigma T^3; \quad l_2 = 1,82216 \cdot 10^{-4}. \end{aligned}$$

Начальное время $t = 0$, начальная температура $T = 0$.

На сфере $r = 2$ задан поток тепла, определяемый соотношением

$$Q = \frac{\sigma c}{4} T^4, \quad c = 3000, \quad \sigma = 1,37.$$

Задача считалась до момента времени $t = 1,3$.

Рассмотрим результаты расчета задачи на сетке, изображенной на рис. 12. Число ячеек сетки — 1722. На рис. 13, 14 (см. также цветную вкладку) приведены поле температур и профили температуры вдоль координатных осей на момент времени $t = 1,3$.

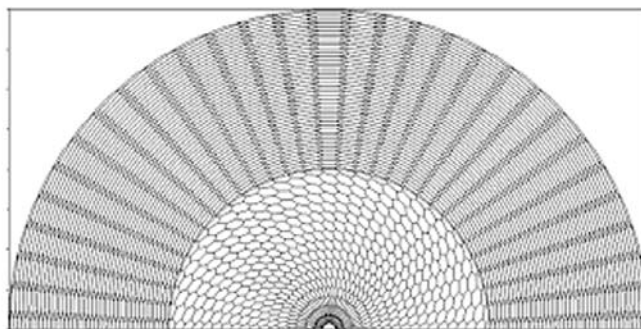


Рис. 12. Стационарная двухобластная задача с функцией источника. Расчетная сетка 1

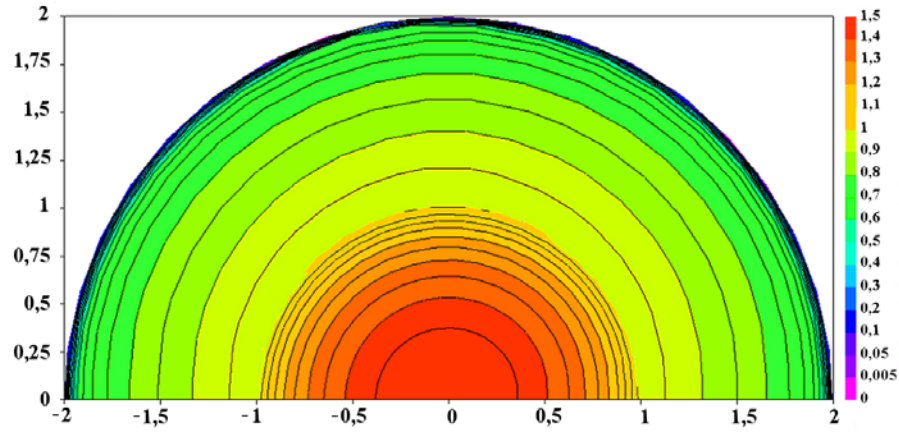


Рис. 13. Стационарная двухобластная задача с функцией источника. Поле температур при расчете на сетке 1, $t = 1,3$

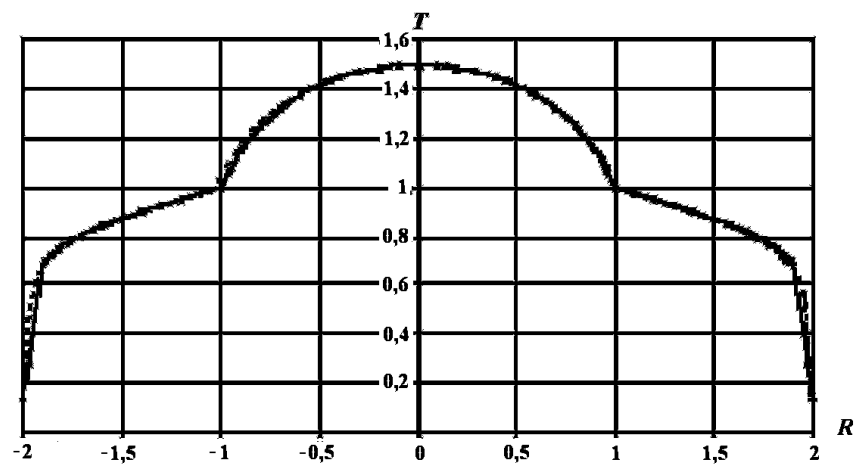


Рис. 14. Профили температуры вдоль координатных осей при расчете на сетке 1, $t = 1,3$: - - - $y = 0$; — — — $x = 0$; \blacklozenge — точное решение

Продемонстрируем результаты расчета на искаженной сетке (рис. 15). На рис. 16, 17 (см. также цветную вкладку) изображены поля температур: полученное при расчете на этой сетке автором статьи и полученное при расчете по программе [2].

На рис. 18 (см. также цветную вкладку) изображены профили температуры вдоль оси OX , полученные при расчетах по описываемой программе и по программе [2].

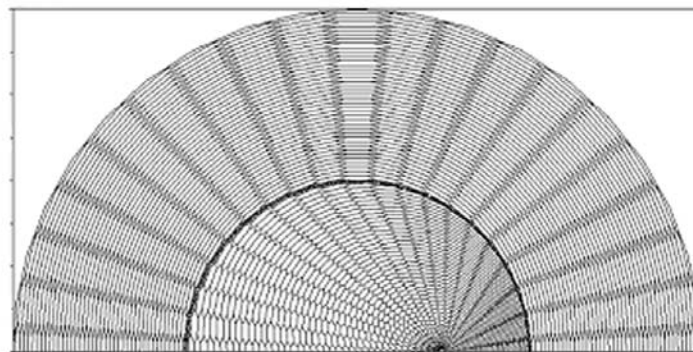


Рис. 15. Расчетная сетка 2, центр в области 1 смещен вправо

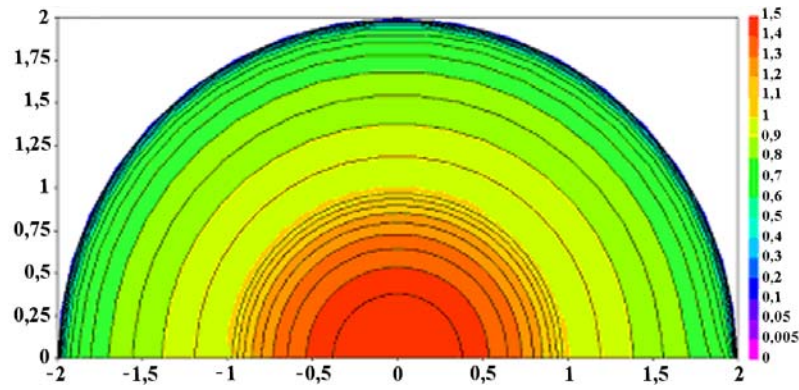


Рис. 16. Поле температур при расчете на сетке 2, $t = 1,3$

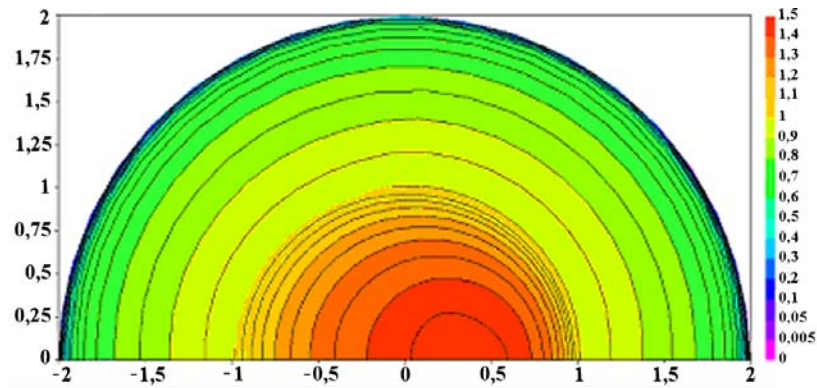


Рис. 17. Поле температур при расчете на сетке 2 по программе [2], $t = 1,3$

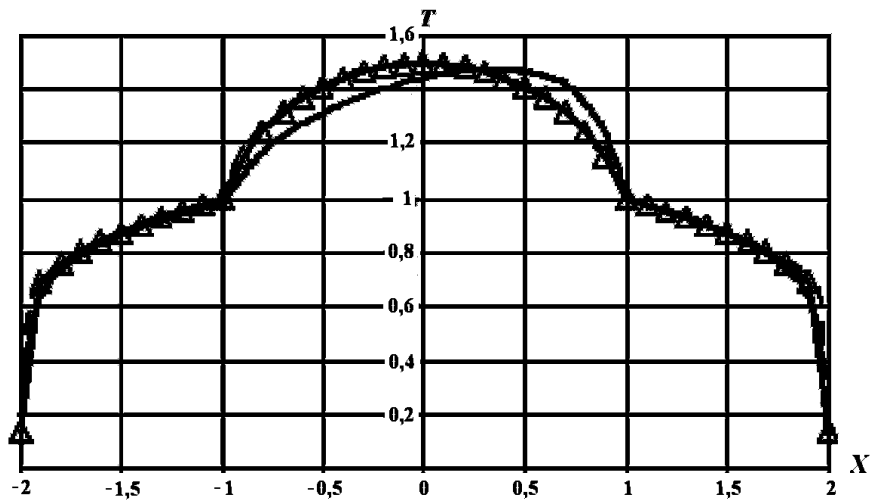


Рис. 18. Профили температур вдоль оси OX , $t = 1,3$: \triangle — точное решение; --- — расчет по описываемой программе; — — расчет по программе [2]

Задача о распространении тепловой волны в трехслойной системе под углом к границам веществ. Задача состоит в расчете процесса прогрева изначально холодной системы, состоящей из трех сильно разноплотных веществ. При этом удельная внутренняя энергия и коэффициент теплопроводности существенно нелинейным образом зависят от температуры. Подробная постановка задачи приведена в [9]. На рис. 19 (см. также цветную вкладку) изображена начальная геометрия системы.

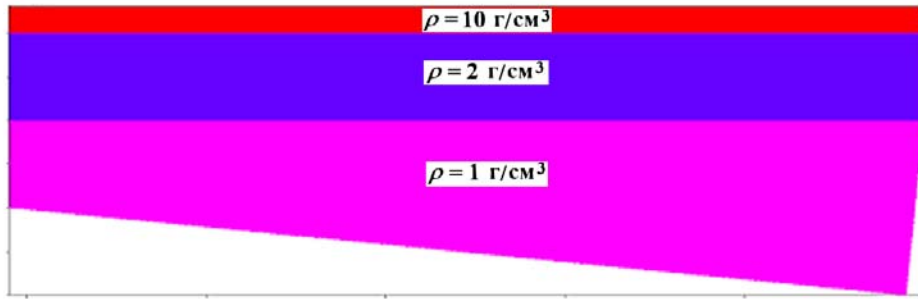


Рис. 19. Задача о распространении тепловой волны в трехслойной системе под углом к границам веществ. Начальная геометрия и поле плотностей

На рис. 20 (см. также цветную вкладку) изображены профили температуры вдоль границ раздела веществ на момент времени $t = 1,0$.

В табл. 1 приведены значения среднеквадратической погрешности, рассчитанной по формуле

$$\delta_{\text{ср}} = \frac{\sqrt{\sum_k \left(\frac{T_k^{\text{числ}} - T_k^{\text{точн}}}{T_k^{\text{точн}}} \right)^2}}{N} \cdot 100 \%,$$

где $T_k^{\text{числ}}$, $T_k^{\text{точн}}$ — численное и аналитическое значения температуры в ячейке с номером k ; N — число чистых ячеек сетки. Суммирование проводилось по всем чистым ячейкам.

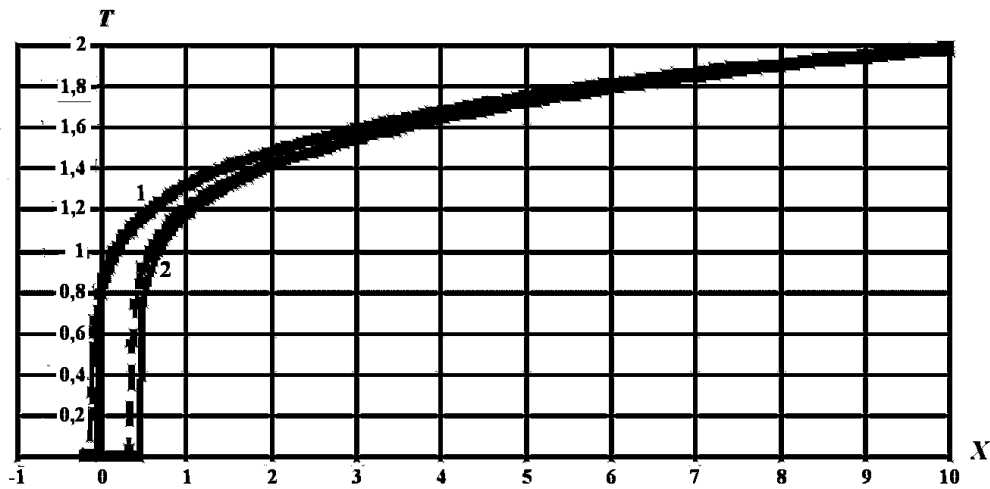


Рис. 20. Профили температуры вдоль границ раздела веществ, $t = 1,0$, число ячеек сетки — 46 754: 1 — решения вдоль прямой $y = 99,98$; 2 — решения вдоль прямой $y = 100,973$; - - - - расчет; — — точное решение

Таблица 1

Среднеквадратическая погрешность расчета, $t = 1,0$

Число ячеек	5 184	12 584	20 400	46 754
$\delta_{\text{ср}}, \%$	0,0936	0,069	0,0583	0,0143

По результатам расчетов приведенных тестовых задач можно сделать вывод, что описанный метод обеспечивает хорошие результаты, в том числе на искаженных сетках.

Распараллеливание программы расчета процесса теплопроводности

В связи с появлением мощных параллельных ЭВМ становится актуальной проблема распараллеливания программ расчета задач математической физики. Идеология распараллеливания методики МЕДУЗА, структура данных и способ распараллеливания программ расчета процесса газовой динамики и интерполяций описаны в работе [11]. Там же описаны способы декомпозиции задачи по процессорам.

Распараллеливание программы расчета уравнения теплопроводности выполнено с использованием параллельной версии библиотеки линейных решателей PMLP. Так же, как в *скалярной версии* программы, матрица линейной системы на каждом процессоре создается с некоторым запасом. Как уже отмечалось, это делается во избежание уничтожения и пересоздания матрицы и связанных с ней массивов в случае увеличения числа рассчитываемых на процессоре ячеек вследствие их добавления, а также миграции ячеек с соседних процессоров. Когда запас ячеек переполнен хотя бы на одном процессоре, матрица и связанные с ней массивы уничтожаются и создаются заново на всех процессорах.

Для работы с параллельной версией библиотеки линейных решателей для каждого процессора необходимо иметь таблицы соответствия локальных номеров ячеек перекрытия на этом процессоре локальным номерам ячеек на соседних процессорах. Для формирования таких таблиц выполняется обмен данными процессора со всеми его соседями. При этом вследствие нерегулярности сетки таблицы необходимо формировать на каждом шаге по времени. Таблицы формируются перед итерационным процессом по нелинейности уравнения состояния и коэффициента теплопроводности.

Для расчета коэффициентов теплопроводности на сторонах ячеек, являющихся межпроцессорными границами, на каждой итерации по нелинейности уравнения состояния и коэффициента теплопроводности выполняется межпроцессорный обмен температурами ячеек перекрытия. Итерации по нелинейности проводятся до сходимости на всех процессорах.

Нумерация ячеек при счете в параллельном режиме отличается от нумерации ячеек той же задачи при счете в скалярном режиме вследствие иной организации циклов обхода по ячейкам сетки. То есть при расчете одной и той же задачи в скалярном и параллельном режимах получаются две разные матрицы, отличающиеся друг от друга расположением элементов в строках (хотя значения этих элементов одинаковы). При этом структура матрицы, полученной при счете в параллельном режиме, шире вследствие дальнего (по сравнению с соседством в скалярной матрице) соседства элементов у межпроцессорной границы — элементы матрицы по разные стороны от межпроцессорной границы, близкие геометрически, являются далеко отстоящими друг от друга по нумерации ячеек.

В качестве примера для одной из тестовых задач на рис. 21 приведены структуры матриц, полученных при ее счете в скалярном и параллельном режимах. На рисунке ясно видно расширение структуры матрицы при переходе от скалярного к параллельному режиму.

Расширение структуры матрицы усложняет ее обращение решателем. Но задача обеспечения идентичности структур матриц, получаемых при счете в параллельном и скалярном режимах, для методики, использующей нерегулярные сетки, чрезвычайно сложна и трудоемка. Возможный выигрыш в скорости счета за счет улучшения структуры матрицы, вероятно, будет нивелирован усложнением программ.

Результаты расчетов в скалярном и параллельном режимах совпадают с точностью до параметра, определяющего точность решения линейной системы решателем.

Эффективность распараллеливания проиллюстрируем на задаче о распространении тепловой волны в трехслойной системе под углом к границам веществ (см. предыдущий раздел и табл. 2). Отсчитывалось 630 шагов по времени с шагом $\tau = 0,000198$ и делались засечки. Эффективность распараллеливания рассчитывалась по следующей формуле:

$$\text{Эффективность распараллеливания} = \frac{\text{Время счета на 1 процессоре}}{\text{Время счета на } N \text{ процессорах} \cdot N} \cdot 100\%.$$



Рис. 21. Структура матрицы: *a* — скалярный режим; *b* — параллельный режим (4 процессора, одномерная декомпозиция *полосы*)

Таблица 2

Эффективность распараллеливания задачи о распространении тепловой волны в трехслойной системе под углом к границам веществ, размер расчетной сетки — 325 824 ячейки

Число процессоров	1	4	8	16	32	64	96
Время общее, с	4 420	1 122	596	305	173	102	79
Эффективность распараллеливания, %	—	98,5	92,7	90,6	80	67	58
Число ячеек, рассчитываемых на процессоре	325 824	81 456	40 728	20 364	10 182	5 091	3 394

Заключение

Разработан метод численного решения двумерного уравнения лучистой теплопроводности на нерегулярной сетке и создана реализующая его программа.

Как показывают тестовые расчеты, метод обеспечивает хорошую точность, большую, чем обеспечивал ранее использовавшийся метод [2]. Эффективность распараллеливания на одной из тестовых задач составляет от 98,5 % до 58 % при изменении числа процессоров от 4 до 96.

Список литературы

1. *Глаголева Ю. П., Жогов Б. М., Кирьянов Ю. Ф. и др.* Основы методики МЕДУЗА численного расчета двумерных нестационарных задач газодинамики // Числ. методы мех. спл. среды. 1972. Т. 3, № 2. С. 18—55.
2. *Жогов Б. М.* Методика численного решения многомерного уравнения теплопроводности на неструктурированных сетках комплекса МЕДУЗА методом локальных балансных итераций на многопроцессорных ЭВМ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 1. С. 15—20.
3. *Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г. и др.* Библиотека решателей разреженных линейных систем // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2004. Вып. 7. С. 80—95.
4. *Панов А. И.* Методика решения уравнения теплопроводности на нерегулярной сетке // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 27—40.
5. *Дмитриев Н. А., Софронов И. Д., Тихомиров Б. П.* Методика расчета одномерных многообластных задач высокотемпературной газовой динамики // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1983. Вып. 3 (14). С. 3—8.

6. *Бондаренко Ю. А., Шагалиева А. Р., Янилкин Ю. В.* Метод расчета теплопроводности с учетом теплообмена между веществами внутри смешанных ячеек // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 4. С. 26–33.
7. *Горбунов А. А., Бутнев О. И., Жогов Б. М., Барабанов Р. А.* Алгоритмы расчета процесса теплопроводности с использованием механизма выделения контактной линии в смешанных ячейках // Сб. докл. IV науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Саров, 2006. С. 43–47.
8. *Скрыпник С. И., Рудько Н. М., Королев Р. А. и др.* Численное решение двумерных уравнений газовой динамики с теплопроводностью с использованием переменного по размеру разностного шаблона // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 1. С. 14–26.
9. *Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Горев В. В. и др.* Описание набора тестов для методик и программ, предназначенных для решения двумерных задач теплопроводности // Там же. 1992. Вып. 2. С. 14–20.
10. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977.
11. *Бутнев О. И., Пронин В. А.* Алгоритмы декомпозиции нерегулярной сетки с учетом вычислительной нагрузки // Там же. 2004. Вып. 4. С. 81–87.

Статья поступила в редакцию 04.04.08.
