

## РАСЧЕТ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МАШИН

539.311

### ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ ПРЯМОГО ВЫЧИСЛЕНИЯ ДЛЯ ОБЪЕМНЫХ ЗАДАЧ С НЕОДНОРОДНЫМИ СВОЙСТВАМИ

*Канд. физ-мат. наук Ф.Х. АХМЕДОВА, ассист. А.Э. ШУМЕЙКО*

*Рассмотрен численный алгоритм решения уравнений типа теплопроводности на основе чередования явной и неявной схемы. Проведена оценка точности и устойчивости решения для предлагаемой схемы. Показана теоретическая возможность получения сходящегося решения с применением схемы прямых вычислений.*

*The numerical algorithm of the decision of the equations of type of heat conductivity on the basis of alteration of the obvious and implicit scheme is considered. The estimation of accuracy and stability of the decision for the offered scheme is lead/ The theoretical opportunity of reception of a converging decision with application of the scheme of direct calculations is shown.*

Существующие методы численного моделирования физических процессов и состояний, основаны на решении дифференциальных уравнений и систем, описывающих процесс. И если к настоящему времени выработан широкий спектр различных, математически формализованных, описаний, то процесс получения практически интересных решений весьма затруднителен и противоречив.

Основной проблемой при создании алгоритмов численного моделирования является удовлетворение противоречивых требований к точности и быстродействию применяемых алгоритмов при постоянном контроле за использованием памяти компьютера. За последние тридцать лет постоянное развитие практики применения численных методов исчерпало возможности

использования классических схем типа только явной или только неявной и в настоящее время осо-

бое внимание разработчиков привлекают либо модификации классических схем, либо их комбинации. Каждая математическая численная схема имеет свои преимущества и свои недостатки.

Явная схема позволяет вычислять новые значения через набор уже известных, но очень жестко ограничивает величину изменения параметров за один шаг, что снижает быстродействие и точность расчетов. Неявная схема является устойчивой в значительно большем диапазоне изменения параметров за один шаг, но при этом каждое значение в точке должно вычисляться вместе с соседними значениями. Это требует формирования и сохранения в памяти компьютера коэффициентов системы линейных уравнений. При этом в зависимости от количества расчетных точек и размерности задачи до 70...80% составляют пустые значения, на проход которых тратится значительное время.

Многомерные процедуры достаточно часто строятся на идее расщепления уравнения при использовании удобного координатного базиса. Применение расщепляющих построений требует особого внимания, особенно если необходимо выполнять граничные условия для производных.

Наиболее простая явная схема согласована с исходным дифференциальным уравнением, но анализ устойчивости по Нейману показывает более строгое ограничение на величину шага по времени по сравнению с неявной схемой. В то же время, к группе явных относится один из наиболее интересных алгоритмов 'игры в классики' Gourlay (1970). Схема рассматривается как двухэтапная и порядок расчета определяется суммой индексов узла. Первоначально определяются значения в узлах с четной суммой, а на базе вычисленных значений определяются значения в узлах с нечетной суммой. Метод имеет ошибку аппроксимации  $O(\Delta t, \Delta x^2)$ , однако в отличие от чисто явной схемы он безусловно устойчив.

Рассмотрим теоретическую оценку поведения комбинированной численной схемы для решения одномерного однородного уравнения теплопроводности вида

$$\frac{\partial P}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = 0$$

В исходной форме алгоритм "игры в классики" используется при первом подсчете величин  $P_j^{n+1}$  по явной схеме для всех, например, нечетных узлов и последующим применением неявной схемы для остальных, т.е. нечетных узлов или :

$$P_j^{n+1} = sP_{j-1}^n + (1 - 2s)P_j^n + sP_{j+1}^n \quad j = 1, 3, \dots, 2k - 1.$$

$$P_j^n = sP_{j-1}^{n+1} + (1 - 2s)P_j^{n+1} + sP_{j+1}^{n+1} \quad j = 2, 4, \dots, 2k.$$

После решения первого уравнения становятся известными величины  $P_{j-1}^{n+1}$  и  $P_{j+1}^{n+1}$ , что позволяет определить  $P_j^{n+1}$  явным методом. Метод безусловно устойчив и его порядок точности  $O(\Delta x^2 + \Delta t^2)$

[1]. Однако, схема применения не меняется по времени, что предполагает отдельное накопление ошибок, связанных с явной и неявной формулами. Предложение новой модификации предполагает чередование применения явной и неявной схем к четным и нечетным узлам.

При решении предлагаемым методом необходимо выделить первый - явный и второй - неявный полушаги. При этом набор значений, определенных на первом полушаге должен позволять простое определение прочих значений. Следующая последовательность действий определяет искомый алгоритм:

- Определим значения искомой функции на первом полушаге в узлах сетки с четной или нечетной суммой индексов по направлениям X, Y и Z по явной схеме. Тогда на первом полушаге определятся  $(N_x * N_y * N_z) / 2$  значений и мы определяем значения функций в "пакете из шахматных досок".
- Далее, для еще неопределенных значений, возможно построить чисто неявную схему. В этом заключается второй полушаг решения. В результате двух полушагов у нас оказался полный набор значений искомой функции на новом расчетном уровне.
- Таким же образом, чередуя в шахматном порядке явное и неявное определение новых значений P повторяем вычисления, только применяя в узле с определением значения по явной схеме неявную и наоборот.

Графическая схема решения одномерной задачи приведена на рис 1.

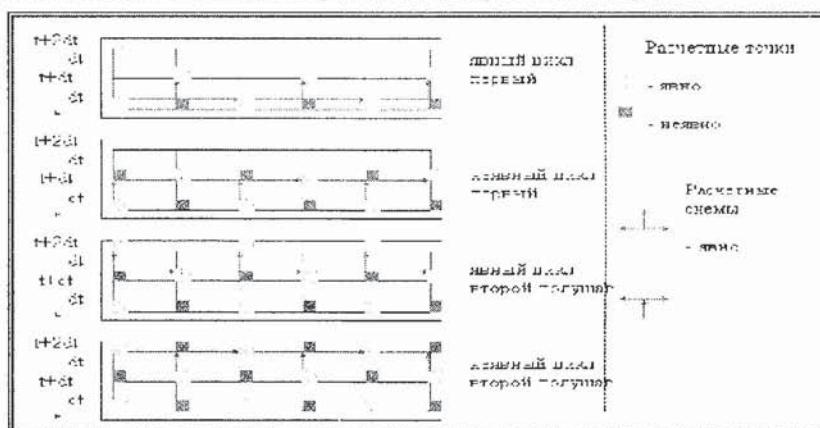


Рис 1. Схема применения двухэтапного метода.

Определим возможности комбинированного алгоритма на основе оценок для явного и неявного шагов и оценки точности процесса комбинированного счета. Если явная и неявная формулы применяются в

обычном виде, то и пошаговая оценка точности должна сохраняться. Возможно, оценка диапазона устойчивости для обеих схем изменится, в связи с их чередующимся применением.

Определим пределы точности, сходимости и устойчивости для численных схем. Для неявной формулы получена оценка погрешности аппроксимации в виде  $E_j^n = -0,5\Delta t \left(1 + \frac{1}{6s}\right) \left[\frac{\partial^2 P}{\partial t^2}\right] + O(\Delta t^2, \Delta x^4)$ . Здесь  $E$  - ошибка аппроксимации, связанная с дискретизацией. Очевидно, что при уменьшении размеров ячеек ошибка аппроксимации  $E$  будет стремиться к нулю и в пределе данная численная схема станет эквивалентна дифференциальному уравнению диффузии. Это демонстрирует согласованность скорректированной неявной численной схемы и исходного дифференциального уравнения.

Для явной формулы получена оценка погрешности аппроксимации в виде

$$E_j^n = 0,5 * \Delta t * \left[\frac{\partial^2 P}{\partial t^2}\right] - \alpha * \left(\frac{\Delta x^2}{12}\right) * \left[\frac{\partial^4 P}{\partial x^4}\right] + O(\Delta t^2, \Delta x^4) \text{ или пользуясь зависимостями:}$$

$$s = \alpha * \Delta t / \Delta x^2 \text{ и } \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} = \alpha^2 \frac{\partial^4 P}{\partial x^4}$$

получаем оценку погрешности:

$$E_j^n = 0,5\Delta t \left[\frac{\partial^2 P}{\partial t^2}\right] - \alpha \left(\frac{\Delta x^2}{12}\right) \left[\frac{\partial^4 P}{\partial x^4}\right] + O(\Delta t^2, \Delta x^4) \text{ или с учетом коррекций в производной по времени:}$$

$$E_j^n = 0,5\Delta t \left[\frac{\partial^2 P}{\partial t^2}\right] \left(1 - \frac{1}{6s}\right) + O(\Delta t^2, \Delta x^4)$$

Здесь  $E$  - ошибка аппроксимации, связанная с дискретизацией. Очевидно, что при уменьшении размеров ячеек ошибка аппроксимации  $E$  будет стремиться к нулю и в пределе данная численная схема станет эквивалентна дифференциальному уравнению диффузии. Это свойство и есть согласованность явной численной схемы и дифференциального уравнения.

Рассмотрим накопление ошибки аппроксимации при чередовании применения явной и неявной схем в каждом узле при постоянном шаге по времени.

Накопление ошибки аппроксимации за цикл составит:

$$E_j^n = 0,5\Delta t \left[\frac{\partial^2 P}{\partial t^2}\right] \left(1 - \frac{1}{6s}\right) + O(\Delta t^2, \Delta x^4),$$

Рассмотрим ошибки, вносимые в расчет в виде:  $\xi_j^n = P_j^n - P_j^n$ , где ошибка есть разность между ожидаемым конечно разностным значением и вычислительной реализацией по скорректированным формулам.

Для неявной схемы по методу Неймана может быть получена оценка устойчивости. Ошибки распространяются в соответствии с уравнением:

$$\xi_j^{n+1} - \xi_j^n = \tilde{s} \xi_{j-1}^{n+1} - 2\tilde{s} \xi_j^{n+1} + \tilde{s} \xi_{j+1}^{n+1}$$

Введем ряд Фурье для выражения ошибки. Поскольку уравнение для ошибки линейное - ошибка определяется единственным слагаемым ряда Фурье:

$$\xi_j^n = (G)^n e^{i\theta j}, \text{ где } i - \text{ мнимая единица, } j - \text{ номер узла сетки}$$

В результате подстановки получаем:

$$(G - 1 - \bar{s}G(e^{-i\theta} - 2 + e^{i\theta}))e^{i\theta j} = 0$$

$$G = 1 - 4\bar{s} \sin^2(\theta/2)$$

Разделим на  $(G)^n$  и вынесем  $e^{i\theta j}$  как общий множитель:

$$(G - 1 - \bar{s}G(e^{-i\theta} - 2 + e^{i\theta}))e^{i\theta j} = 0$$

Окончательно: 
$$G = \frac{1}{1 + 4\bar{s} \times \sin^2(\theta/2)}$$

Решение устойчиво при  $(G \leq 1$  для любого  $\theta$ , т.е. при  $1 + 4\bar{s} \times \sin^2(\theta/2) \geq 1$  или при  $\bar{s} \geq -\frac{1}{4}$

Так как  $\bar{s} \geq 0$  по определению, то неявный конечно разностный алгоритм устойчив при любых величинах и сочетании пространственных и временных шагов сетки.

Аналогично, для явной схемы возможно получить условие устойчивости

Решение устойчиво при  $(G \leq 1$  для любого  $\theta$ , т.е. при  $1 - 4\bar{s} \times \sin^2(\theta/2) \leq 1$  или при  $\bar{s} \leq \frac{1}{4}$

Для проверки устойчивости схемы применяем метод Неймана, определяя коэффициент усиления для каждого полушага. Устойчивость последовательности двух шагов определится произведением двух коэффициентов усиления, а именно:

$$G = G_{\text{явр}} G_{\text{явр}} = \frac{1}{1 + 4s \times \sin^2(\theta/2)} \times (1 - 4s \times \sin^2(\theta/2))$$

Решение устойчиво при  $(G \leq 1$  для любого  $\theta$ , т.е.

$$-1 \leq \frac{1 - 4s \times \sin^2(\theta/2)}{1 + 4s \times \sin^2(\theta/2)} \leq 1,$$

Условие выполняется при  $s \geq 0$ , т.е. двухэтапный конечно разностный алгоритм устойчив при любых величинах и сочетании пространственных и временных шагов сетки.

Предлагаемый способ численного решения ориентирован на решения уравнений вида:

$$\nabla[K\nabla p] = \alpha \frac{\partial p}{\partial t} + Q(x, y, z)$$

причем слагаемое  $\frac{\partial p}{\partial t}$  может быть использовано и для решения стационарных задач в качестве фиктивного параметра, управляющего сходимостью итерационного процесса численного решения к иско-

мому стационарному. К данному типу приводятся уравнения теплопроводности, фильтрации в пористой среде. Приведем пример решения задач нестационарной теплопроводности и фильтрации в пористой среде и продемонстрируем возможности применяемого метода. Проверка точности получаемого решения осуществлена на трех задачах с однородными исходными данными, допускающих точное решение. Точное решение определялось методом Фурье.

**ТЕСТ 1.** Рис.2. Одиночный источник постоянной температуры в кубе  $12*12*12= 1728$  узлов. Цель- определить возможность получения устойчивого и максимально точного решения на простой схеме, соответствующей реальной задаче. В центре находится источник внезапно изменившейся температуры.

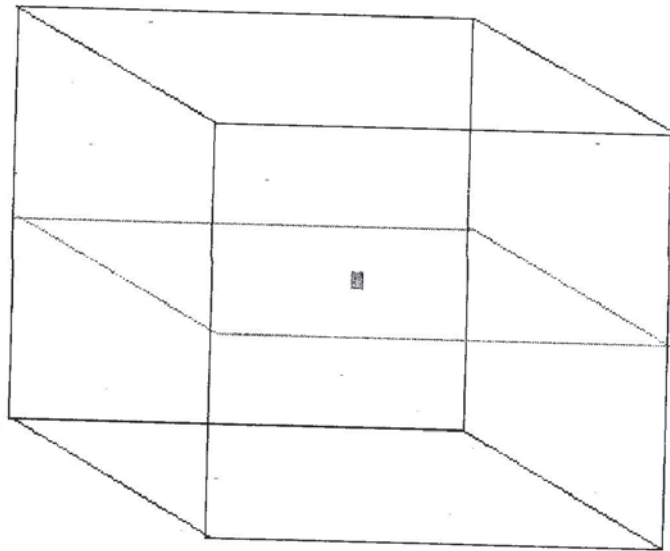


Рис. 2 Одиночный источник в центре куба

Граничные условия заданы условием постоянной температуры на гранях куба. Расчеты показали среднее квадратичное отклонение по 1728 точкам равным 0.00023. На Рис.3 представлено изменение температуры по времени при различных скоростях приращения шага по времени.

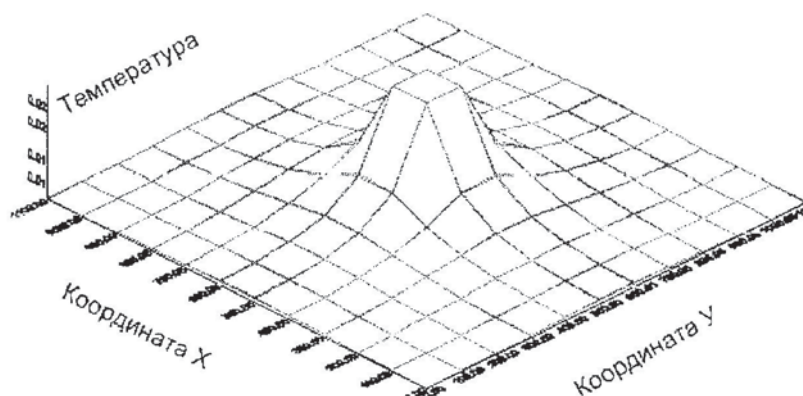


Рис. 3 Распределение температур в среднем слое

Работоспособность алгоритма демонстрируется вариацией шага по времени от 0.001 сек. до 10 часов с сохранением устойчивости и точности решения. Контрольная точка точного решения изображена на Рис.4 для времени, равного 50 часам. При заданной скорости приращения шага по времени получена точность решения:

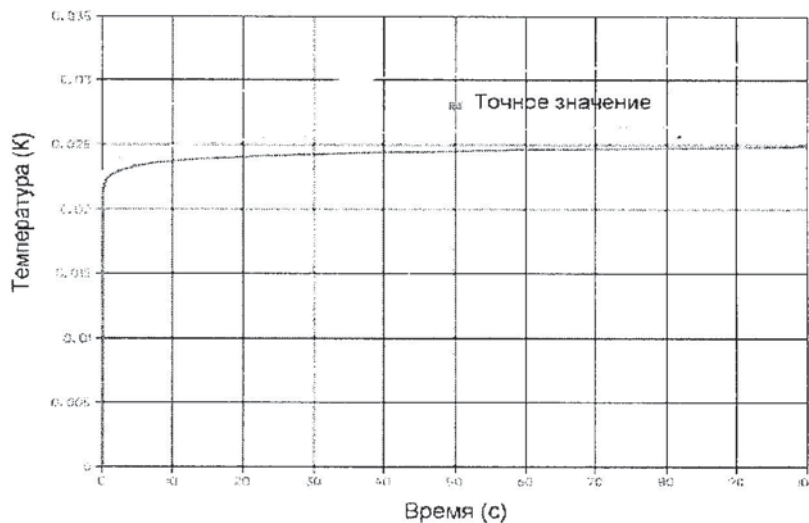


Рис. 4. Изменение максимальной температуры по времени

Скорости приращения шага по времени	Таблица		
	1%	5%	10%
Точность определения T при t= 50 часов	14%	7%	10%

Необходимо отметить, что величина приращения шага позволяет получать устойчивые решения, как меньше точного значения, так и больше точного значения. Таким образом, настройкой оптимального значения величины приращения шага по времени можно добиться устойчивого численного решения с точностью, соизмеримой с 1%. Для данной задачи приращение шага составило 7% +/-1%

**ТЕСТ 2.** Рис. 5 Анализ результатов работы модели с условием по количеству тепла в двух точках. Цель- проверка алгоритма на задаче с извлечением жидкости с одной плотностью и закачке жидкости с другой плотностью. В этом случае среднее давление в объеме куба не стабилизируется со временем, а линейно изменяется. Однако быстрое изменение давление за короткий промежуток времени сохраняется.

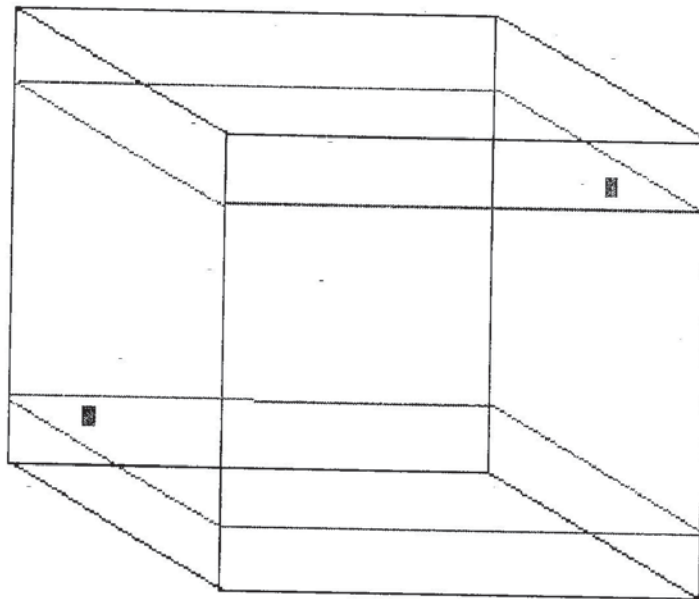


Рис 5. Два источника в углах куба

Полученное решение на рис. 6,7 демонстрирует хорошее совпадение результатов численного и точного решения в слое источника и посредственное в среднем слое куба. Однако среднее квадратичное отклонение результатов составила 0.00078 за счет значительного изменения давления в окрестности источников и незначительного в удаленных зонах.



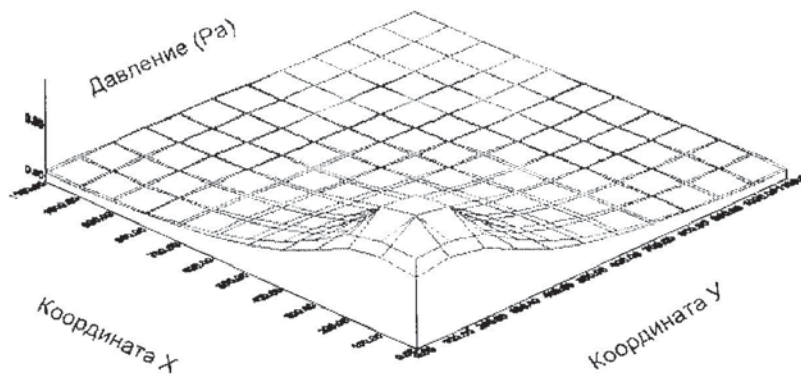


Рис 6. Распределение давлений в слое источника

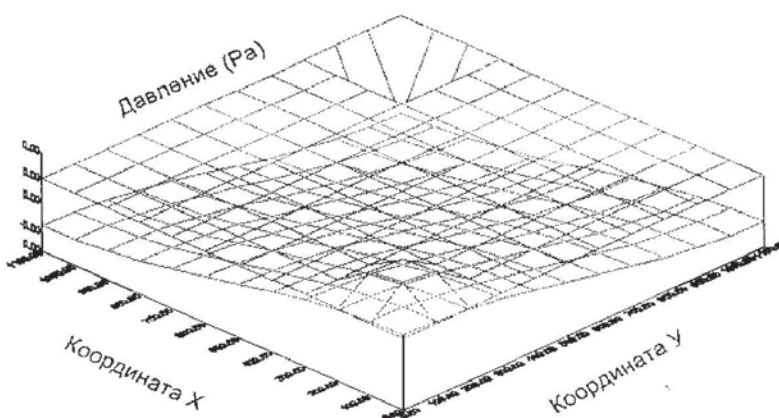


Рис 7. Распределение давлений в среднем слое

**ТЕСТ 3.** Рис. 8. Анализ результатов работы модели с дипольным типом источников. Цель- определение параметров численного решения для задачи с условием быстрого изменения расчетного параметра- давления или температуры в объеме расчетного тела.

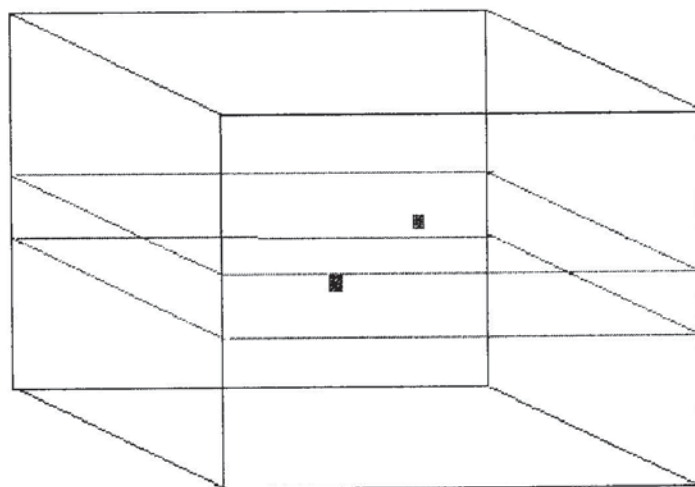


Рис 8. Двойной источник-сток в центре куба

При выборе оптимального шага по времени получено решение со средним квадратичным отклонением по отношению к точному - 0.00048. При этом зафиксировано смещение средней величины расчетного параметра в слое на малую постоянную величину. Полученное решение демонстрирует устойчивое поведение при переходе от этапа быстрого изменения расчетного параметра к устойчиво изменяющемуся в малом, и асимптотически стремящемуся к решению стационарной задачи. Результаты численного расчета представлены на Рис 9 – процесс изменения максимальной величины расчетного параметра и на Рис 10- распределение расчетного параметра в среднем слое куба.

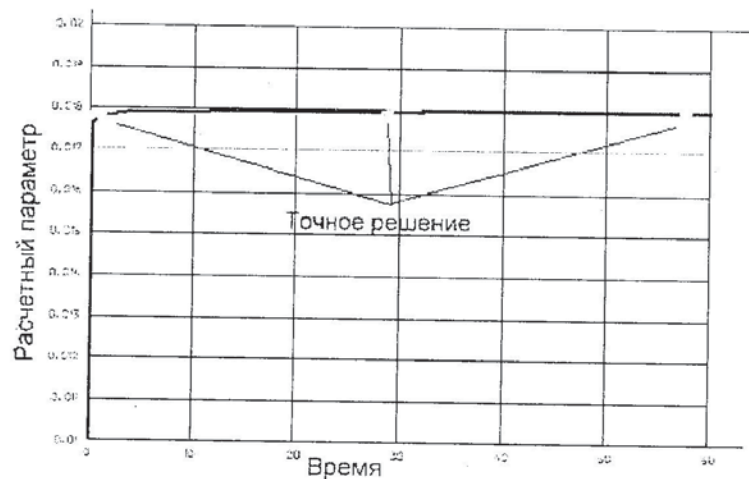


Рис. 9 Изменение максимальной величины расчетного параметра по времени

Таким образом, алгоритм прямого счета, разработанный по модифицированной схеме 'игры в классики' продемонстрировал возможность решения нестационарных задач теплопроводности, фильтрации в пористой среде, базируясь на явной численной схеме. Это позволяет получать решения с максимальным использованием оперативной памяти компьютеров и выполнять расчеты задач в высокой детализацией свойств объектов. При решении нестационарных задач, особенно при зависимости свойств от текущих расчетных значений, алгоритм вполне конкурентоспособен по сравнению с существующими по возможности сохранения устойчивости решения при большом количестве итераций. Оценка точности алгоритма показывает его применимость к проведению инженерных расчетов процессов и состояний для неоднородных объемных задач.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. К. Флетчер, Вычислительные методы в динамике жидкостей, Мир, Москва 1991., т.1,2.
2. Gourlay A.R., Meguire G.R., General hopscotch algorithm for the numerical solution of partial differential equations, J.Inst. Math. Appl., 7, pp. 216-227, 1971
3. Gourlay A.R., Hopscotch; A fast second order partial differential equation solve, J Inst. Math. Appl., 6, pp 375-3909
4. Н.Н.Калиткин. Численные методы, Наука, Москва, 1979.