

DOI: 10.51790/2712-9942-2023-4-3-03

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ PYTHON ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫХ ЗАДАЧ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ

Т. Н. Садыков^{1,a}, В. А. Галкин^{1,2,b}, Д. А. Моргун^{1,c}

¹ Сургутский филиал Федерального государственного учреждения «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Сургут, Российская Федерация

² Сургутский государственный университет, г. Сургут, Российская Федерация

^a ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-2794-6524>, ✉ t.sadykov2015@mail.ru

^b ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9721-4026>, val-gal@yandex.ru

^c ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0692-1583>, morgun_da@office.niisi.tech

Аннотация: в работе описана реализация численного метода контрольного объема для решения одного класса трехмерных начально-краевых задач теплопроводности в шаре на языке программирования Python. Проведено тестирование на задаче с аналитическим решением и выполнена визуализация результатов расчета средствами Python.

Ключевые слова: уравнение теплопроводности, метод контрольного объема, Python.

Благодарности: работа выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (выполнение фундаментальных научных исследований ГП 47) по теме № 0580-2021-0007 «Развитие методов математического моделирования распределенных систем и соответствующих методов вычисления».

Для цитирования: Садыков Т. Н., Галкин В. А., Моргун Д. А. Использование Python для численного решения начально-краевых задач уравнения теплопроводности и визуализации результатов. *Успехи кибернетики*. 2023;4(3):31–38. DOI: 10.51790/2712-9942-2023-4-3-03.

Поступила в редакцию: 24.06.2023.

В окончательном варианте: 25.07.2023.

USING PYTHON FOR NUMERICAL SOLUTION OF THE HEAT EQUATION INITIAL BOUNDARY VALUE PROBLEMS AND VISUALIZATION

T. N. Sadykov^{1,a}, V. A. Galkin^{1,2,b}, D. A. Morgun^{1,c}

¹ Surgut Branch of Federal State Institute “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences”, Surgut, Russian Federation

² Surgut State University, Surgut, Russian Federation

^a ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-2794-6524>, ✉ t.sadykov2015@mail.ru

^b ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9721-4026>, val-gal@yandex.ru

^c ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0692-1583>, morgun_da@office.niisi.tech

Abstract: this study uses the control volume method for solving a class of 3D initial-boundary value problems of the heat equation in a ball with Python. The code was tested with an analytically solvable problem, and the results were visualized.

Keywords: heat equation, control volume method, Python.

Acknowledgements: this study is a part of the government contract 47 GP with the Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences, project No. 0580-2021-0007 Advancing Distribution System Simulation and Computation Methods.

Cite this article: Sadykov T. N., Galkin V. A., Morgun D. A. Using Python for Numerical Solution of the Heat Equation Initial Boundary Value Problems and Visualization. *Russian Journal of Cybernetics*. 2023;4(3):31–38. DOI: 10.51790/2712-9942-2023-4-3-03.

Original article submitted: 24.06.2023.

Revision submitted: 25.07.2023.

Введение

Многие задачи гидродинамики, теплообмена и массопереноса, с которыми в настоящее время приходится сталкиваться в разных областях науки, не поддаются аналитическому решению, и единственная возможность их теоретического анализа — получение численного решения. Одной из таких

задач является решение начально-краевой задачи теплопроводности, которая возникает при изучении теплообмена в различных материалах и конструкциях.

Язык программирования Python выделяется большим и активным сообществом научных расчетов. Использование Python для этой цели в промышленных и академических кругах значительно расширилось с начала 2000-х годов. Перспективным является его применение для численного решения задач математической физики [1]. Хотя он имеет репутацию медленного языка, этот недостаток восполняют скорость написания программ и удобство синтаксиса, но главное — наличие большого количества специально написанных для инженерных и математических расчетов оптимизированных библиотек, по скорости работы сопоставимых с C++ и Java [2].

Целью этой работы является программная реализация численного метода контрольного объема для решения класса трехмерных начально-краевых задач теплопроводности на языке программирования Python, тестирование на задачах с аналитическим решением и визуализация результатов расчета средствами Python.

Начально-краевая задача

Решается однородное уравнение теплопроводности в шаре B радиуса r_0 с условием теплоизоляции на его поверхности и заданным начальным распределением температуры внутри области:

$$\left. \begin{aligned} B : r < r_0 \\ T(r, \theta, \varphi, t) : \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha^2 \Delta T \\ \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{\partial B} = 0 \\ T|_{t=0} = T_0(r, \theta, \varphi) \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Аналитическим решением задачи (1) является линейная комбинация собственных функций, имеющих вид [3]:

$$u_{n,m,k}(r, \theta, \varphi, t) = \exp\left(-\left(\mu_n^k \frac{\alpha}{r_0}\right)^2 t\right) j_n\left(\mu_n^k \frac{r}{r_0}\right) Y_n^m(\theta, \varphi), \quad (2)$$

$$n, m, k \in \mathbb{Z}, \quad n \geq 0, \quad -n \leq m \leq n, \quad k \geq 1.$$

Здесь $j_n(\cdot)$ — сферическая функция Бесселя порядка n :

$$j_n(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{n+\frac{1}{2}}(z),$$

$J_{n+\frac{1}{2}}(\cdot)$ — функция Бесселя порядка $n + \frac{1}{2}$,

μ_n^k — k -ый корень производной сферической функции Бесселя n -ого порядка:

$$j_n'(\mu_n^k) = 0, \quad (3)$$

$Y_n^m(\theta, \varphi)$ — сферическая функция.

Численный метод

Для численного решения используется метод контрольных объемов с полностью неявной схемой и схемой Кранка-Николсона [4]. Сущность метода заключается в следующем: на каждой итерации по времени в каждой расчетной точке рассчитываются коэффициенты дискретного аналога и решается заданная ими система линейных уравнений с начальным значением с предыдущего временного слоя, если таковое требуется.

На рис. 1 приведены используемые обозначения для одного условного контрольного объема. Точками обозначены расчетные точки, линиями – границы контрольных объемов. Буквой P обозначена расчетная точка внутри рассматриваемого контрольного объема, напрямую соседствующие обозначаются буквами U, D, N, S, W, E , соответственно: сверху (Up), снизу ($Down$), к северу ($North$), к югу ($South$), к западу ($West$), к востоку ($East$) от точки P . Грани контрольного объема обозначаются строчной версией буквы соседней точки напротив.

Пусть A – соседняя точка, ξ – координата. Тогда:

$\Delta\xi$ – размер контрольного объема вдоль координаты ξ ;

$\delta\xi_a = \|\xi_P - \xi_A\|$ – расстояние между точками P и A вдоль координаты ξ .

Также всегда $\delta\theta = \Delta\theta$, $\delta\varphi = \Delta\varphi$, но $\delta r = \Delta r$ только для внутренних объемов.

По переменной φ крайние половинки являются частями одного объема, замыкая область.

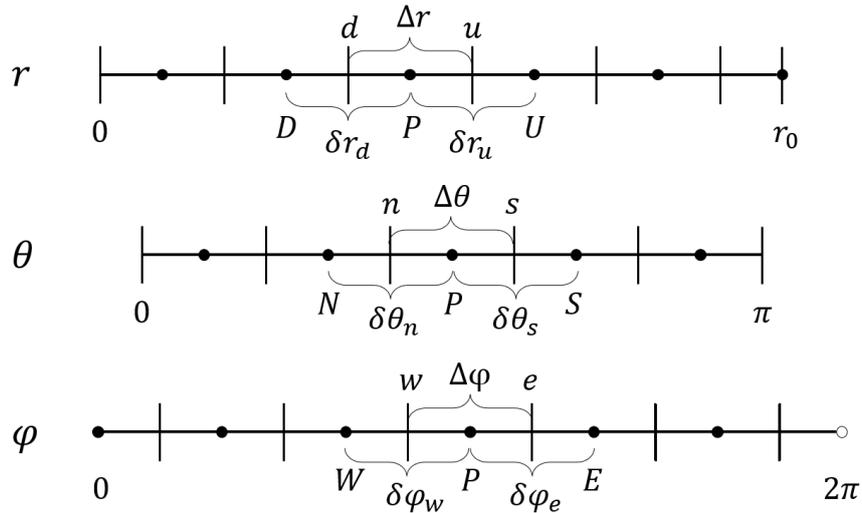


Рис. 1. Распределение контрольных объемов по каждой из переменных

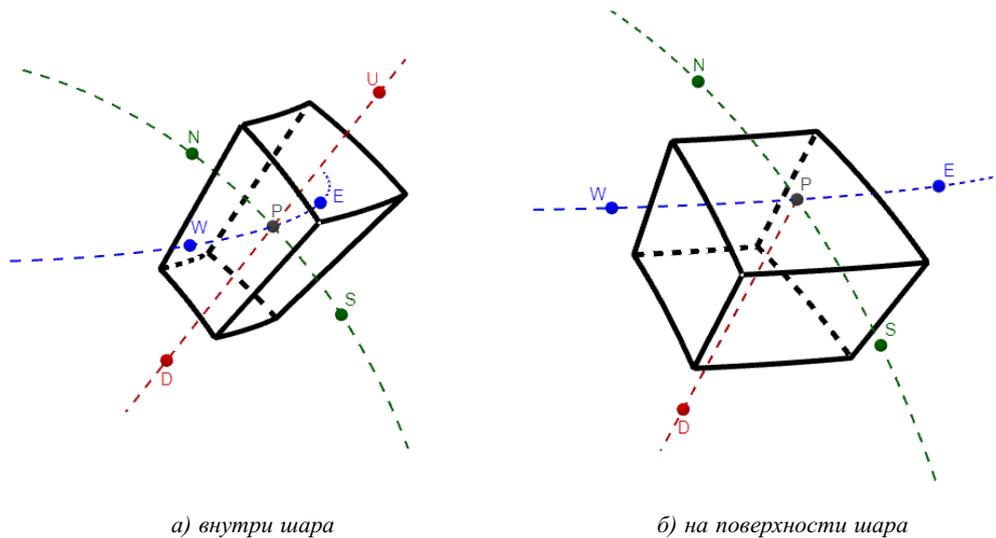


Рис. 2. Виды контрольного объема

На рис. 2 показан вид контрольного объема внутри шара и на его поверхности. Во внешнем контрольном объеме точка P лежит на грани u .

Дискретный аналог

Уравнения дискретного аналога записываются в виде:

$$a_P T_P = a_U T_U + a_D T_D + a_S T_S + a_N T_N + a_E T_E + a_W T_W + b_P.$$

В этой работе его коэффициенты были выведены применительно к задаче (1) на равномерной сетке в сферической системе координат.

Коэффициенты полностью неявной схемы:

$$\begin{aligned}
 a_U &= \frac{2}{\delta r} r_u^2 \sin \theta_P \sin \frac{\Delta \theta}{2} \Delta \varphi, \\
 a_D &= \frac{2}{\delta r} r_d^2 \sin \theta_P \sin \frac{\Delta \theta}{2} \Delta \varphi, \\
 a_S &= \frac{1}{\delta \theta} \sin \theta_s \Delta r \Delta \varphi, \\
 a_N &= \frac{1}{\delta \theta} \sin \theta_n \Delta r \Delta \varphi, \\
 a_E &= \frac{1}{\delta \varphi} \frac{1}{\sin \theta_P} \Delta r \Delta \theta, \\
 a_W &= \frac{1}{\delta \varphi} \frac{1}{\sin \theta_P} \Delta r \Delta \theta, \\
 \Delta V &= \frac{2}{3} (r_u^2 + r_u r_d + r_d^2) \sin \theta_P \sin \frac{\Delta \theta}{2} \Delta r \Delta \varphi, \\
 a_P^0 &= \frac{\Delta V}{\alpha^2 \Delta t}, \\
 a_P &= a_P^0 + a_U + a_D + a_S + a_N + a_E + a_W, \\
 b_P &= a_P^0 T_P^0, \\
 r = r_0 &: a_U = 0.
 \end{aligned}$$

Коэффициенты схемы Кранка-Николсона:

$$\begin{aligned}
 a_U \dots a_W & \text{ — те же, что в полностью неявной схеме,} \\
 a_P^0 &= \frac{2 \Delta V}{\alpha^2 \Delta t}, \\
 a_P &= a_P^0 + a_U + a_D + a_S + a_N + a_E + a_W, \\
 d^0 &= a_U (T_U^0 - T_P^0) + a_D (T_D^0 - T_P^0) + a_S (T_S^0 - T_P^0) + a_N (T_N^0 - T_P^0) + a_E (T_E^0 - T_P^0) + a_W (T_W^0 - T_P^0), \\
 b_P &= a_P^0 T_P^0 + d^0, \\
 r = r_0 &: a_U = 0.
 \end{aligned}$$

Значения температуры с верхним индексом 0 (T_{\dots}^0) берутся с предыдущего временного слоя.

Решение системы линейных уравнений

Система решается методом переменных направлений, комбинацией метода Гаусса-Зейделя и метода прогонки. На каждой итерации последовательно выбирается одно направление, по которому температура на текущем слое рассчитывается, а значения температур по остальным направлениям берутся с предыдущей итерации.

Сначала выбирается направление r , вдоль него системы будут иметь вид:

$$a_P T_P = a_U T_U + a_D T_D + (b_P + a_S T_S^* + a_N T_N^* + a_E T_E^* + a_W T_W^*)$$

и решаться методом прогонки.

Затем системы вдоль направления θ

$$a_P T_P = a_S T_S + a_N T_N + (b_P + a_U T_U^* + a_D T_D^* + a_E T_E^* + a_W T_W^*)$$

решаются также методом прогонки.

И вдоль направления φ системы

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + (b_P + a_U T_U^* + a_D T_D^* + a_S T_S^* + a_N T_N^*)$$

решаются методом циклической прогонки [5], модификацией для трехдиагональных матриц с ненулевыми угловыми элементами, порожденными условием периодичности по координате φ .

Вычислительный эксперимент

Решается следующая тестовая начально-краевая задача:

$$\left. \begin{aligned} B : r \leq 1 \\ T(r, \theta, \varphi, t) : \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \Delta T \\ \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{\partial B} = 0 \\ T|_{t=0} = T_0(r, \theta, \varphi) \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

где функция начального условия T_0 задается следующим образом:

$$\begin{aligned} T_0(r, \theta, \varphi) = \sum_{k=1}^2 \sum_{n=0}^3 \sum_{m=-n}^n C_{n,m,k} v_{n,m,k}(r, \theta, \varphi) = \\ = 3v_{0,0,1} + 1v_{1,-1,1} + 4v_{1,0,1} + 1v_{1,1,1} + 5v_{2,-2,1} + \\ + 9v_{2,-1,1} + 2v_{2,0,1} + 6v_{2,1,1} + 5v_{2,2,1} + 3v_{3,-3,1} + \\ + 5v_{3,-2,1} + 8v_{3,-1,1} + 9v_{3,0,1} + 7v_{3,1,1} + 9v_{3,2,1} + \\ + 3v_{3,3,1} + 2v_{0,0,2} + 3v_{1,-1,2} + 8v_{1,0,2} + 4v_{1,1,2} + \\ + 6v_{2,-2,2} + 2v_{2,-1,2} + 6v_{2,0,2} + 4v_{2,1,2} + 3v_{2,2,2} + \\ + 3v_{3,-3,2} + 8v_{3,-2,2} + 3v_{3,-1,2} + 2v_{3,0,2} + 7v_{3,1,2} + 9v_{3,2,2} + 5v_{3,3,2}, \quad (5) \end{aligned}$$

$$v_{n,m,k}(r, \theta, \varphi) = j_n \left(\mu_n^k r \right) Y_n^m(\theta, \varphi).$$

Задача (4) является частным случаем общей задачи (1) с $r_0 = 1$, $\alpha = 1$ и T_0 , записанным в (5). Эта задача имеет аналитическое решение:

$$u_{n,m,k}(r, \theta, \varphi, t) = \exp \left(- \left(\mu_n^k \right)^2 t \right) v_{n,m,k}(r, \theta, \varphi) = \exp \left(- \left(\mu_n^k \right)^2 t \right) j_n \left(\mu_n^k r \right) Y_n^m(\theta, \varphi),$$

$$T_{an}(r, \theta, \varphi, t) = \sum_{k=1}^2 \sum_{n=0}^3 \sum_{m=-n}^n C_{n,m,k} u_{n,m,k}(r, \theta, \varphi, t).$$

На рис. 3 представлены отдельные кадры из сгенерированной программой визуализации.

На трех графиках изображены изотермы решений, т. е. линии уровня. Используется 31 уровень, распределенный равномерно от минимального до максимального в начальном условии. Зеленые линии уровня представляют численное решение, красные – аналитическое.

Верхний график (φ, θ) является полной разверткой поверхности шара. Нижний левый график (x, y) является ортогональной проекцией поверхности шара на плоскость Oxy , нижняя полусфера показана более тускло.

Нижний правый график (x, y) является сечением шара плоскостью Oxy . Аналитические функции являются линейной комбинацией «первых» 32 ($n = 0, 1, 2, 3$; $m = -n \dots n$; $k = 1, 2$) собственных функций уравнения теплопроводности с коэффициентами из $[0, 10]$.

Качество сетки определяет количество расчетных точек вдоль радиуса N_r , разбиение вдоль других направлений определяется¹: $N_\theta = \lfloor \pi N_r \rfloor$, $N_\varphi = \lfloor 2\pi N_r \rfloor$ для формирования квазиравномерной сетки с $\Delta r \approx \Delta \theta \approx \Delta \varphi$.

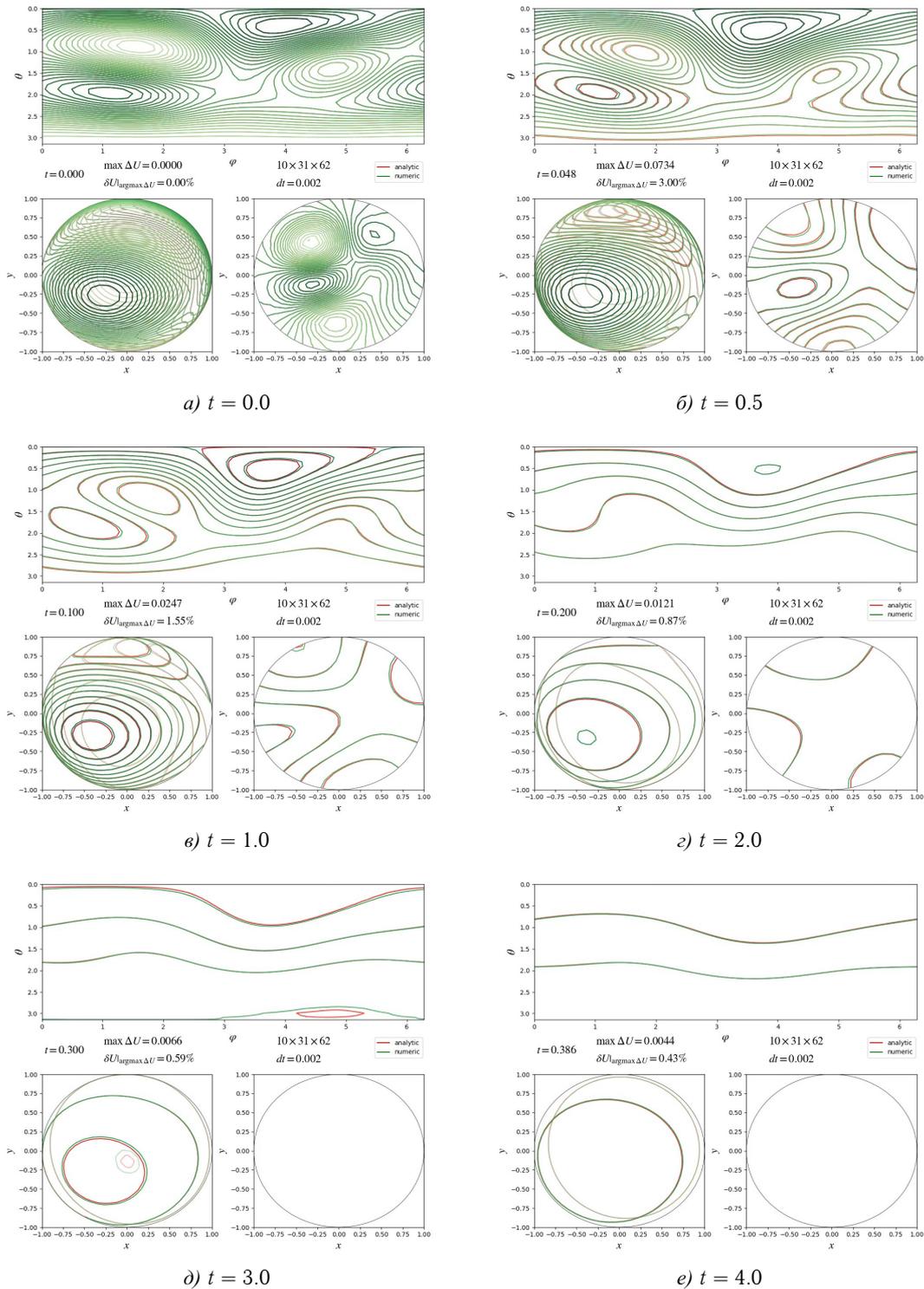


Рис. 3. Визуализация результатов вычислительного эксперимента. Представлены отдельные кадры на моменты времени, наиболее близкие к указанным.

На кадре выводятся сетка и шаг по времени, максимальная абсолютная погрешность и относительная погрешность в точке, где достигается максимальная абсолютная погрешность. Для вычислительного эксперимента на рис. 3 использовались следующие параметры: $\Delta r = 0.1$, $\Delta t = 0.2$.

Также проведена серия вычислительных экспериментов без визуализации для эмпирической установки порядка сходимости методом Рунге использованного численного метода с разными схемами: полностью неявной и схемой Кранка-Николсона. Погрешность рассчитывается для различных

¹ $[x]$ означает целую часть числа x .

комбинаций шага по сетке $\Delta r \approx \Delta \theta \approx \Delta \varphi$ и шага по времени Δt при общей длительности $t = 0.3$. В качестве погрешности используется максимальная абсолютная погрешность во всей расчетной области за все расчетное время, $\Delta = \max_{B, 0 < t \leq 0.3} |T - T_{an}|$. Графики погрешности в зависимости от частоты разбиения сетки и шага по времени представлены в виде поверхностей на рис. 4.

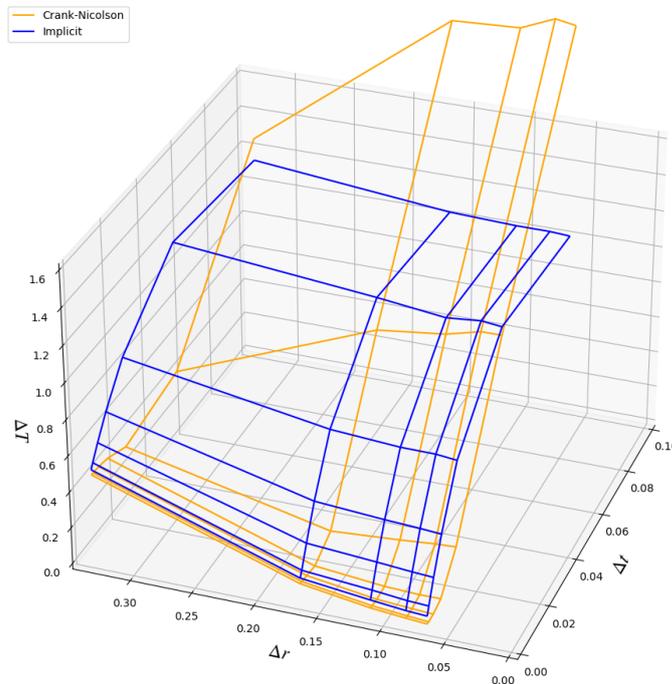


Рис. 4. Абсолютные погрешности схем метода контрольного объема для тестовой задачи в зависимости от двух параметров: Δr , Δt . Синяя поверхность — полностью неявная схема, оранжевая поверхность — схема Кранка-Николсона

По виду поверхностей можно сделать несколько выводов. Полностью неявная схема дает меньшую погрешность для грубых сеток (большое Δr). Обе схемы имеют *второй* порядок сходимости по пространственной координате. По времени полностью неявная схема имеет *первый*, а схема Кранка-Николсона — *второй* порядок сходимости.

Особенности программной реализации

В реализации программы использовались несколько распространенных библиотек Python. С помощью `matplotlib` выполнена математическая визуализация, из `scipy` брались реализации специальных функций (Бесселя, сферические), а также метод Брента [6] для нахождения корней уравнения (3). Функции `numru` для работы с многомерными массивами реализованы на более низкоуровневом языке Си, а декораторы `numba` переводят код Python в машинный код во время выполнения, поэтому комбинация этих библиотек позволила значительно повысить производительность программы.

Заключение

На языке программирования Python реализован алгоритм численного метода контрольного объема для решения поставленного класса трехмерных начально-краевых задач теплопроводности в шаре с использованием средств библиотек Python. Для сферической сетки выведены расчетные формулы коэффициентов дискретного аналога с использованием полностью неявной схемы и схемы Кранка-Николсона. Сделаны выводы о порядке сходимости метода с полностью неявной схемой и схемой Кранка-Николсона на основе отличия численного решения от аналитического. Построена визуализация динамики численного и аналитического решений во времени с использованием средств визуализации Python.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мартьянова, А. Е. Использование свободного программного обеспечения для решения одной задачи математической физики. *Вестник Астраханского государственного технического университета. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика*. 2020;1:84–93.
2. Кирдяев М. М. Обзор языка программирования Python для решения задач математического моделирования. *Труды Международного симпозиума «Надежность и качество»*. 2016;1:305–307.
3. Тихонов А. Н., Самарский А. А. *Уравнения математической физики: учебник для вузов*. М.: Изд-во Московского государственного университета; 2004. 742 с.
4. Патанкар С. *Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости*. М.: Энергоатомиздат; 1984. 152 с.
5. Абрамов А. А., Андреев, В. Б. О применении метода прогонки к нахождению периодических решений дифференциальных и разностных уравнений. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1963;3(2):377–381.
6. Brent R. P. *Algorithms for Minimization without Derivatives*. Courier Corporation; 2013. 208 p.