

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРАХ

Л.И. Рубина, О.Н. Ульянов, М.А. Чащин

Институт математики и механики Уральского отделения РАН, Екатеринбург

We present the results of developing the numerical method for solving radiation transfer problems taking into account energy balance equation. Algorithms are developed for the case of Voight radiation and absorption profiles., The results of numerical experiments obtained using supercomputers are presented.

Введение

Перенос излучения и процессы, связанные с переносом излучения в однородных и неоднородных средах, вызывают большой интерес исследователей. Детальное изучение процесса переноса излучения и связанных с ним процессов - непростая задача, приводящая к обработке больших многомерных массивов информации и к проведению больших объемов вычислений. Авторы на протяжении ряда лет изучали перенос излучения в плоском слое смеси веществ, содержащем до десятка подслоев, имеющих разные плотности и температуры, при наличии до сотен резонансных линий. Профили излучения и поглощения в линиях были двух типов - доплеровские и фойгтовские.

В рассматриваемых ранее математических моделях температура смеси оставалась постоянной или кусочно-постоянной при решении задачи [1-6].

Однако для более правильного описания физического процесса при решении уравнений температуру требуется определять, используя информацию о спектре излучения в среде. При этом температура становится функцией пространственной координаты, если рассматривается стационарный процесс. В процессе решения задачи нужно совместно с решением уравнения переноса излучения (УП) и уравнения кинетики (УК) решать уравнение энергобаланса (УБ) для температуры в среде.

Постановка задачи

Рассматривается стационарный случай задачи переноса излучения в плоском слое смеси веществ. Слой конечной толщины L может состоять из отдельных подслоев D_m ($1 \leq m \leq M, M \leq 10$). В каждом подслое смесь может обладать своими характеристиками

(состав, плотность, температура). Смесь состоит из Γ компонент, γ - номер компоненты. Атомы каждой компоненты могут быть в нескольких состояниях с разной степенью возбуждения и ионизации. Каждое состояние определяется парой индексов (iI) , где I - степень ионизации, i - номер (дискретного) возбужденного состояния для данной степени ионизации. Число резонансных линий для γ - ой компоненты обозначается $n^{(\gamma)}$.

Относительная доля ионов γ - го вещества, находящегося в состоянии (iI) , обозначается $c_{iI}^{(\gamma)}(x)$ и называется населенностью этого состояния. Все населенности для каждой конкретной компоненты вещества можно считать некой векторной величиной $\vec{c}^{(\gamma)}(x) = (c_1^{(\gamma)}(x), c_2^{(\gamma)}(x), \dots, c_r^{(\gamma)}(x))$. Они удовлетворяют системе уравнений кинетики (УК)

$$W^{(\gamma)} \vec{c}^{(\gamma)} = \vec{b}^{(\gamma)} \quad (\text{УК})$$

Элементы кинетических матриц $W^{(\gamma)}(x)$ и компоненты вектора $b^{(\gamma)}(x)$ зависят от средних по углу и энергии интенсивностей излучения. Кроме того, имеется условие нормировки $\sum_{iI} c_{iI}^{(\gamma)} = 1$.

Вещества в смеси связаны через поле излучения. Интенсивность излучения зависит от векторов населенностей для каждого вещества в смеси. Если $I(x, \mu, \varepsilon, Te)$ - интенсивность излучения вдоль некоторого луча (μ - косинус угла между направлением луча и осью x , ось направлена перпендикулярно поверхности слоя) в точке среды x с энергией ε и электронной температурой Te , то в среде выполняется уравнение переноса излучения

$$\mu \frac{dI}{dx} + \kappa I = S \quad (\text{УП})$$

Здесь $\kappa = \kappa(\mu, \varepsilon, Te, c_{jj}^{(\nu)})$ - коэффициент поглощения, $S = S(\mu, \varepsilon, Te, c_{jj}^{(\nu)})$ - функция источника, $\mu \in [-1, 1]$: $x \in (0, L)$ при $\mu > 0$: $x \in [0, L)$, если $\mu < 0$, $\varepsilon \in [-\infty, \infty]$.

Будем рассматривать случай, когда $Te = Te(x)$ и удовлетворяет уравнению энергоданса

$$-\kappa_0 Te^n \frac{d^2 Te}{dx^2} = 2\pi \int d\mu [\kappa I + S] d\varepsilon \quad (\text{УБ})$$

Здесь κ_0 - коэффициент, являющийся функцией эффективного заряда атомного ядра смеси, n - показатель теплоемкости. Ранее для доплеровского контура излучения рассматривалось уравнение энергоданса, когда $\kappa_0 = 0$. В настоящей работе приведены результаты решения системы уравнений (УК, УП, УБ) для случая фойгтовского профиля излучения и произвольного коэффициента κ_0 . Рассматривается однородный плоский слой.

О методе решения уравнения (УБ)

В уравнении (УБ) сделаем замену, полагая $Q = Te^{(n+1)}$. Для определения функции Q получаем уравнение

$$\frac{d^2 Q}{dx^2} = -[2\pi(n+1)/\kappa_0] \int d\mu [\kappa I + S] d\varepsilon \quad (\text{УБ 1})$$

Сравнивая (УП) и (УБ1), получаем

$$\frac{dQ}{dx} = [2\pi(n+1)/\kappa_0] \int \mu d\mu \int I d\varepsilon, \quad \kappa_0 \neq 0 \quad (\text{УБ 2})$$

Решение уравнения (УБ 2) может быть сведено к последовательному вычислению трех интегралов

$$J_T(x, \varepsilon) = \int \mu I d\mu, \quad Int(x) = \int J_T d\varepsilon, \quad Q(x_{i+1}) = [2\pi(n+1)/\kappa_0] \int_{x_i}^{x_{i+1}} Int(x) dx, \quad (i = 0, 1, \dots, l),$$

$Te(x_{i+1}) = Q^{1/(n+1)}(x_{i+1})$. $\{x_0, x_1, \dots, x_l\}$ - сетка по пространственной переменной.

Об особенностях программ, используемых для решения задач

Для решения поставленной задачи использовались два различных подхода. Цель одного подхода – получение результатов решения задачи за минимальное время. Этот подход использует для расчетов полиномы Лагранжа с узлами Чебышева (МПЛЧ). Подход экономичен при серийных расчетах качественно похожих задач, но для получения достаточно точных результатов требует специальной настройки при переходе к новым задачам.

Цель другого подхода (МАПИ) - получение результатов с гарантированной точностью решения для любой решаемой задачи. При этом могут использоваться разнообразные сетки по пространственной переменной, в том числе и сетки по узлам Чебышева, используются также сетки, которые подбираются специально для каждой рассчитываемой функции (метод Лобатто). Алгоритм решения хорошо распараллеливается, но высокая точность расчетов требует большого времени счета варианта или слишком большого числа процессоров в параллельной программе. Использование для расчетов обоих методов и получение при этом совпадающих результатов гарантирует правильность решения задачи.

Для комплексов программ МАПИ и МПЛЧ были разработаны соответствующие алгоритмы и программы расчета поставленной выше задачи. В обоих комплексах для получения окончательного результата использовался метод итераций.

На основе МАПИ был разработан комплекс программ MAPILL, в котором все интегралы по энергетической переменной вычисляются по методу Лобатто с гарантированной точностью. Для вычисления интегралов по угловой и пространственной переменной строятся полиномы Лежандра. В комплексе MAPILL предусмотрено распараллеливание по резонансным линиям, по пространственной и угловой переменной. Распределение по процессорам зависит от наличия в системе свободных процессоров на момент счета.

В комплексе МПЛЧ для счета интегралов используются полиномы Лагранжа с узлами Чебышева. Предварительно интервал интегрирования разбивается на дополнительные подинтервалы, на которых и строятся полиномы Лагранжа по узлам Чебышева. Комплекс МПЛЧ распараллеливается в системе DVM по угловой переменной.

О выборе сетки в комплексе МПЛЧ при решении задачи

Расчет одного и того же варианта на одной и той же сетке по пространственной переменной в случае, когда температура $Te = Te(x)$ на комплексах МАПИ и МПЛЧ привел к несовпадающим результатам. Причем в обоих расчетах населенности уровней и температура имели не характерные для них флуктуации (рис. 1, рис. 2).

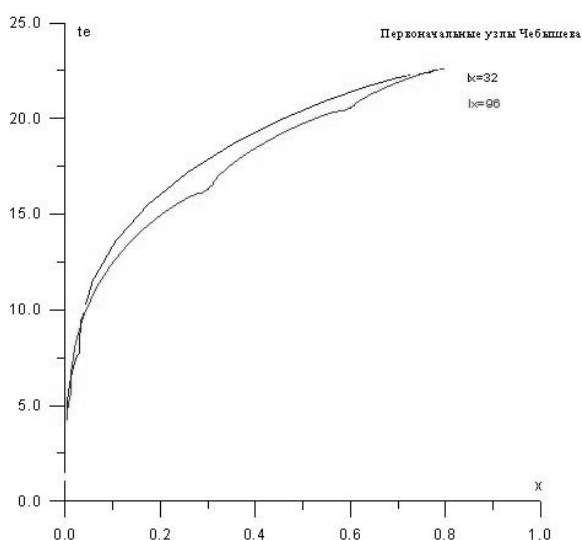


Рис. 1

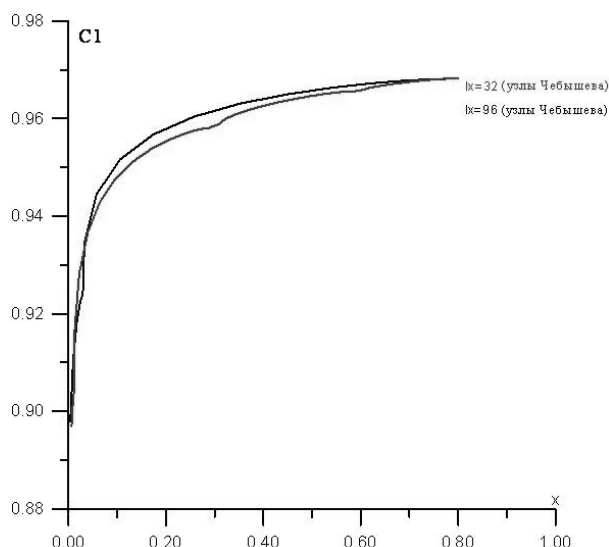


Рис. 2

На использованной в расчетах сетке по пространственной переменной, содержащей узлы Чебышева, ранее проводились расчеты вариантов, когда температура $Te = const$. Результаты расчетов совпадали. В случае переменной температуры была проведена серия расчетов (с использованием комплекса МАПИ) на равномерных сетках, интервалы которых каждый раз уменьшались в два раза ($l=30, 60, 120, 240$). Расчеты показали, что как

населенности, так и температуры $Te(x)$ сходятся к достаточно гладким функциям (рис. 3 и рис. 4).

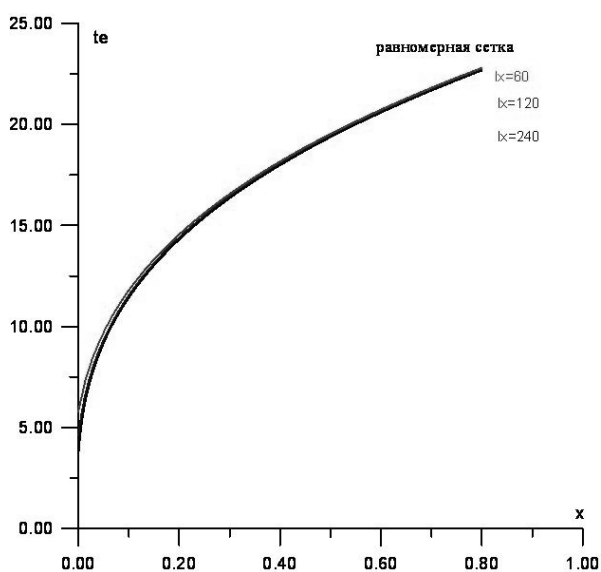


Рис. 3

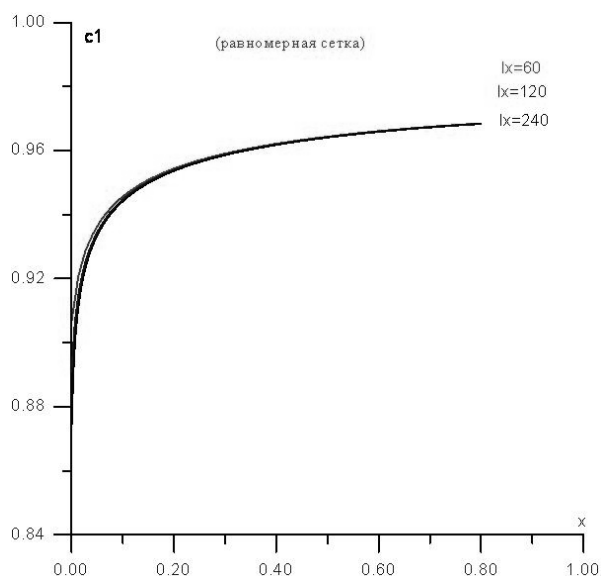


Рис. 4

Сходимость была более быстрой, чем в вариантах, где $Te = const$. В прежних вариантах для сходимости требовалось до 300 итераций, в случае использования уравнения (УБ 2) процесс сходился за 30-40 итераций. Стало ясно, что сетку, содержащую узлы Чебышева следует перестраивать. После нескольких попыток в комплексе МПЛЧ была получена такая сетка по пространственной переменной, на которой расчеты по обеим методикам совпали (рис. 5 и рис. 6).

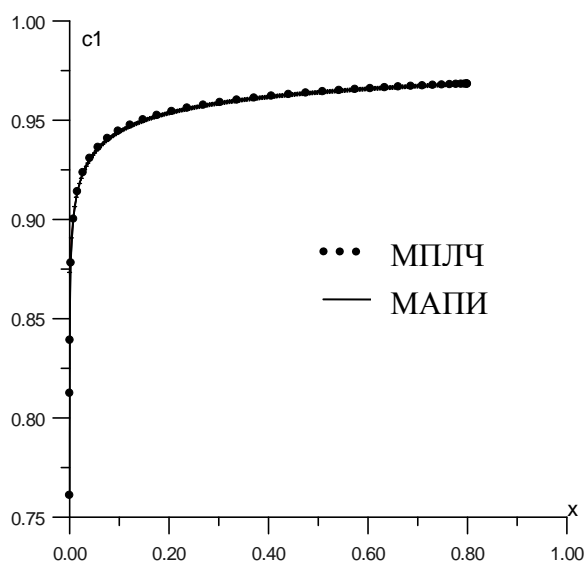


Рис. 5

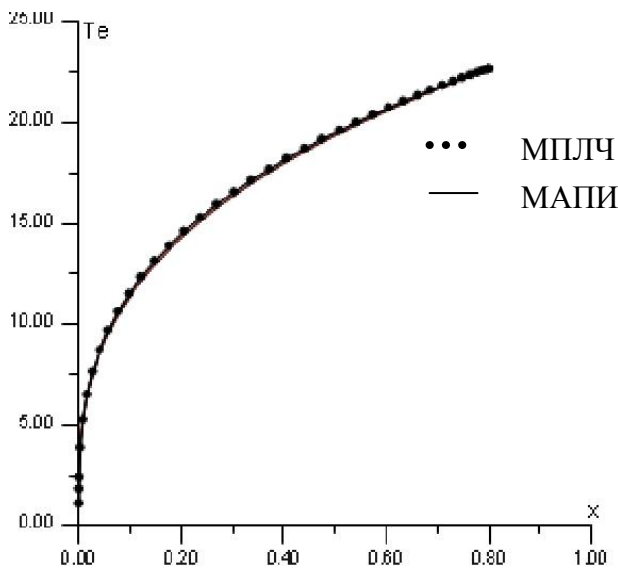


Рис. 6

О влиянии энергобаланса на расчет интенсивности излучения

Была проведена серия расчетов при $Te=const$ и с учетом уравнения энергобаланса. На рис. 7 изображена интенсивность излучения в случае с заданной температурой ($Te=1.5$). На рис. 8 изображена интенсивность излучения в случае с рассчитываемой из уравнения энергобаланса температурой. Качественно графики не изменились, а изменились лишь количественно (рассчитываемый вариант: 4 компоненты, 156 линий). Тем не менее,

результаты расчетов показывают существенность учета влияния энергобаланса при численном моделировании взаимодействия вещества и излучения в рассматриваемом диапазоне изменения параметров.

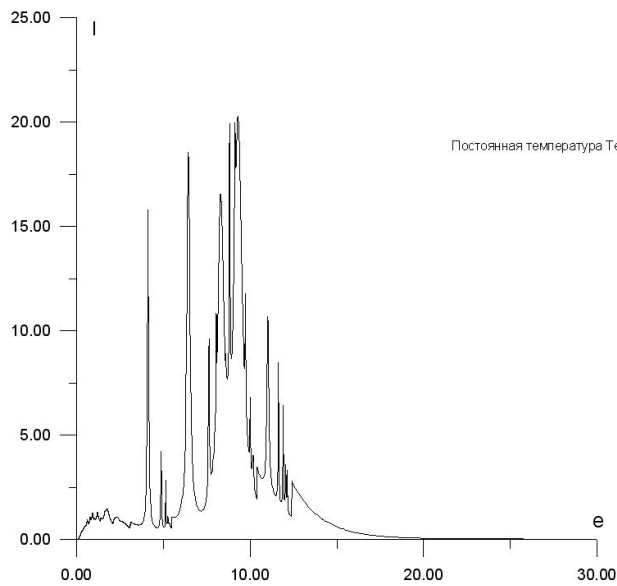


Рис. 7

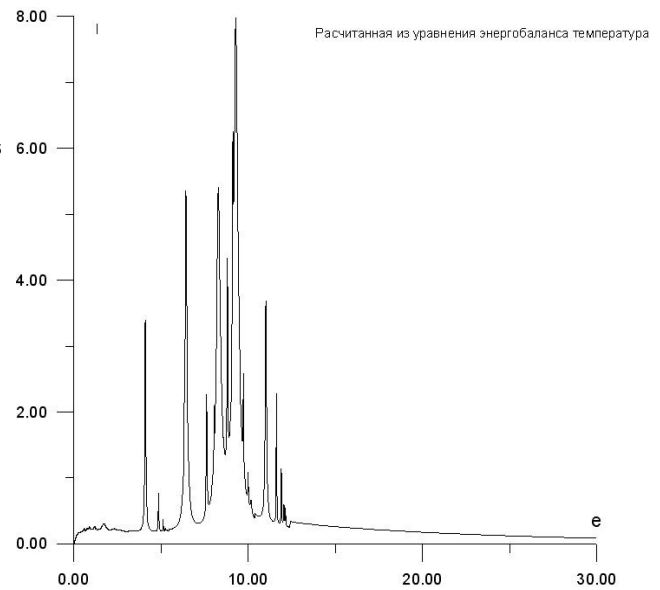


Рис. 8

О сокращении времени счета при использовании нового комплекса МПЛЧ

Расчеты с учетом сотен резонансных линий потребовали работы по сокращению времени счета варианта. В результате на основе комплекса МПЛЧ был создан новый комплекс. Сокращение времени счета в новом комплексе МПЛЧ наглядно демонстрируют следующие таблицы данных расчета одного и того же варианта на старом комплексе МПЛЧ (Таблица 1) и на новом комплексе (Таблица 2). Хорошо сопоставляются времена счета на 16 процессорах. Здесь времена отличаются на порядок. Рассчитываемый вариант: 2 линии, 2 компоненты, без уравнения энергобаланса. Здесь N – число процессоров, $T(N)$ – время счета, $H(N)$ – ускорение, $Q(N)$ – эффективность распараллеливания.

Таблица 1.

N	$T(N)$ (сек.)	$H(N)$	$Q(N)$
1	6.12	1.0	100%
16	0.39	15.7	98%
32	0.26	23.5	73%
64	0.20	30.6	47%
128	0.16	38.3	30%
151	0.15	40.8	27%

Таблица 2.

N	$T(N)$ (сек.)	$H(N)$	$Q(N)$
2	14.7	1.0	100%
4	7.9	1.86	93%
8	5.3	2.77	69%
16	4.0	3.68	45%
32	3.1	4.74	29%

Заключение

Авторами на протяжении ряда лет разрабатывается методика моделирования взаимодействия излучения с плоским слоем вещества, основанная на реализации двух методов (МАПИ и МПЛЧ) численного решения задачи переноса излучения. В статье представлены результаты развития методики для случая фойгтовских профилей излучения и поглощения. Основными из них являются:

- разработка алгоритма решения уравнения энергобаланса, создание программ и проведение численных расчетов;
- создание комплекса программ для решения задачи радиационного переноса в плоском слое смеси веществ с учетом нескольких сотен спектральных линий;
- разработка нового алгоритма и программы МПЛЧ, позволивших на порядок сократить время расчетов по сравнению с ранее применявшимся параллельным алгоритмом МПЛЧ;
- создание методики на основе метода МАПИ, позволяющей решать задачу с заданной (гарантированной) точностью;
- изучение поведения интенсивности излучения и населенностей уровней при различных значениях заданной электронной температуры, а также при учете энергобаланса в математической модели.

Список литературы

- [1] Леликова Е.Ф., Рубина Л.И., Ульянов О.Н., Чашин М.А. Параллельные вычислительные технологии в задаче о переносе радиационного излучения. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. М. 2002. Вып.3. С. 3-13.
- [2] Леликова Е.Ф., Рубина Л.И., Ульянов О.Н., Чашин М.А. Параллельные вычисления в задачах, возникающих при математическом моделировании переноса излучения. Автоматика и телемеханика, 2007, № 5. С.126-140.
- [3] Леликова Е.Ф., Ульянов О.Н., Рубина Л.И., Чашин М.А. Параллельные вычисления в задачах, возникающих при математическом моделировании переноса излучения. В кн.: Энциклопедия низкотемпературной плазмы (Серия "Б", том VII-1 «Математическое моделирование в низкотемпературной плазме». Часть 3. Под ред. ч.к. РАН Ю.П. Попова. Гл. редактор энциклопедической серии академик В.Е. Фортов.). М.: ЯНУС-К, 2008. 698 с. С.514-522.
- [4] Чашин М.А., Л.И. Рубина, О.Н. Ульянов. "Развитие алгоритмов для задач моделирования радиационного переноса". Тезисы докладов Всероссийской школы молодых исследователей и V Всероссийской конференции "Актуальные проблемы прикладной математики и механики", посвященной памяти академика А.Ф. Сидорова (Абрау-Дюрсо, 13-18 сентября 2010 г). Екатеринбург: УрО РАН, 2010. С. 86.
- [5] Чашин М.А., Е.Ф. Леликова, Л.И. Рубина, О.Н. Ульянов. "Численное моделирование переноса излучения в смесях веществ". Тезисы международной конференции "Х Забабахинские научные чтения", РФЯЦ-ВНИИТФ, 2010г. Снежинск. С.272-273.
- [6] Чашин М.А., Е.Ф. Леликова, Л.И. Рубина, О.Н. Ульянов. "Параллельные вычислительные технологии в задаче о переносе излучения", Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2010): Труды международной научной конференции (Уфа, 29 марта – 2 апреля 2010 г.) [Электронный ресурс] – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2010. (стр. 692). ISBN 978-5-696-03987-9 Электронное издание].