Особенности разделения процессов физического моделирования в континуально-корпускулярных вычислительных экспериментах

А. В. Богданов[1], А. Б. Дегтярев[1], В. Н. Храмушин[2,a]

[1] Санкт-Петербургский государственный университет, факультет прикладной математики – процессов управления, Санкт-Петербург

[2] Сахалинское отделение Российского Научно-технического общества судостроителей им. А.Н. Крылова, Южно-Сахалинск

E-mail: [a] Khram@mail.ru

Рассматриваются принципы разделения вычислительных процессов при реализации прямых вычислительных экспериментов с использованием прямого континуально-корпускулярного моделирования в корпускулярных физических пространствах и механике сплошных сред. Эффективные алгоритмы для решения прикладных задач складываются при комплексном рассмотрении архитектурных особенностей вычислительных систем в совокупности с инженерным представлением физических сущностей моделируемых процессов и явлений. В настоящем исследовании пространственные аппроксимационные построения дополняются численными алгоритмами для моделирования свободных поляризованных корпускул, взаимодействующих в процессах моделирования только со смежными пространственными узлами, образующими сопряженные ячейки частиц сплошной среды.

Ключевые слова: тензорная математика, алгоритм, числовые объекты, вычислительный эксперимент, крупные частицы, поляризованные корпускулы, гидромеханика

Работа выполнена при частичной поддержке Сахалинского отделения Российского научно-технического общества судостроителей имени А. Н. Крылова, Санкт-Петербургского государственного университета (проект № 0.37.155.2014), а также грантов РФФИ (N 16-07-01111, 16-07-00886, 16-07-01113)

Введение

Исследование возможности достижения высокой эффективности вычислительных экспериментов при моделировании естественных процессов и явлений в трехмерных физических пространствах делает востребованным построение особого математического аппарата, непосредственно ассоциированного с набором операций и числовых объектов в архитектуре современных вычислительных систем. Традиционное математическое определение физических законов в интегральной и дифференциальной формах отличается рассогласованием методов последовательных или рекуррентных зависимостей с техническими возможностями параллельных вычислений, требующих разбиение моделируемого процесса на множество независимых процессоров. Последнее обеспечивается универсальным аппаратом трехмерных геометрических преобразований в однородных координатах с автоматической визуализацией результатов, в том числе включающих графические сцены в наглядных перспективных проекциях.

Оптимальным вариантом математического моделирования выбирается метод разделения вычислительного эксперимента на этапы с пространственной интерполяцией неразрывных (континуальных) явлений внутри сеточной области с условно подвижными (нерегулярными) узлами для контроля состояния моделируемых физических параметров. В образующихся смежных ячейках позиционируются соразмерные подвижные и деформируемые корпускулы, обладающие инерционными свойствами и особой поляризаций, для сопряжения свободных частиц во взаимозависимые кластеры в непосредственной близости от опорных ячеек исходной сеточной области.

Краткий свод основных обозначений [1]

T – абсолютный отсчет; $t = \Delta T = {}^{k+1}T - {}^{k}T$ [с] – расчетный интервал времени;

${}_{\Omega}^{+}\vec{R}$ [м] – точка в сеточном пространстве Ω на следующий (+) шаг во времени;

$\hat{\boldsymbol{r}} = \vec{r_i} = r_{ij}$ [м^3] – геометрический тензор формы сеточной ячейки – крупной частицы жидкости;

$\hat{\boldsymbol{\omega}} = {}_{\Delta}\vec{V}_i$ [м^3/с] – тензор течений внутри крупной частицы жидкости в абсолютных координатах;

$\overset{<}{\boldsymbol{v}} = \hat{\boldsymbol{v}} \cdot \check{\boldsymbol{r}}$ [с$^{-1}$] – тензор конвективных скоростей в сопряженном локальном базисе;

$\overset{>}{\boldsymbol{m}} = m^{i}{}_{j} = \check{\boldsymbol{\rho}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}$ [кг] – объемная – инерционная масса виртуальной ячейки – частицы;

$\overset{>}{\boldsymbol{\tau}} = \check{\boldsymbol{\eta}} \cdot \hat{\boldsymbol{\rho}}$ [м/с] – тензор кинематической и динамической $\check{\boldsymbol{\eta}}$ [Н·с/м^3, кг/с/м^2] вязкости;

$\overset{>}{\boldsymbol{\mu}} = \check{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \hat{\boldsymbol{\rho}}$ [м] – модуль и размерный тензор $\check{\boldsymbol{\kappa}}$ [Н/м^3, кг/с^2/м^2] – сдвиговой упругости;

$\vec{f}$ [Н = кг·м/с^2] – массовые силы, распределенные по объему частицы жидкости;

$\hat{\boldsymbol{f}}$ [Н·м^2 = кг·м^3/с^2] – тензор поверхностных напряжений на гранях ячейки-частицы;

Численная модель эксперимента в гидромеханике

Разделение этапов прямого численного моделирования востребует взаимосогласованные геометрические алгоритмы [Богданов, Дегтярев, Храмушин, 2015] для аппроксимации неразрывных физических полей гладкими тензорными или градиентными зависимостями в трехмерном пространстве сеточных ячеек: $\hat{\boldsymbol{r}}$ [м^3], которые на сопряженной корпускулярной фазе формализуются элементарными пространственными диполями и вихреисточниками $\check{\boldsymbol{\rho}}$ [кг/m^3], участвующими в свободном и взаимозависимом потоке реальной жидкости.

[1] Более полный перечень и соглашения о построении обозначений приведены в [Храмушин, 2005]

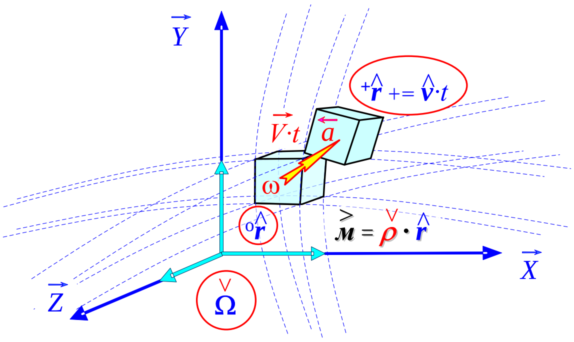

Рис. 1. Пространственное представление сеточной ячейки – виртуальной подвижной и деформируемой корпускулы сплошной среды

Векторная трактовка закона Ньютона связывает массовую силу $\vec{f}$ [кг·м/с^2] с приращением количества движения $\vec{v}\cdot\overset{>}{\boldsymbol{m}}/t$ для подвижной и деформируемой частицы во времени:

$$\vec{v}\cdot\overset{>}{\boldsymbol{m}} = \vec{f}\cdot t\,, \qquad [\text{кг}\cdot\text{м/с}],$$

где тензорная масса $\overset{>}{\boldsymbol{m}} = \overset{\vee}{\boldsymbol{\rho}}\cdot\overset{\wedge}{\boldsymbol{r}}$ [кг] поляризуется оператором $\overset{\vee}{\boldsymbol{\rho}}$ [кг/m^3] с предысторией движения жидкой корпускулы в пространстве линейных аппроксимаций. На континуальном этапе в сеточных узлах $_{\Omega}\vec{R}$ [м] доопределяются величины абсолютных $\overset{+}{_{\Omega}}\vec{V}$ [м/с] и локальных скоростей $\overset{\wedge}{\boldsymbol{v}}$ [м^3/с] в окрестностях расчетных ячеек $\overset{\wedge}{\boldsymbol{r}}$ [м^3] с учетом трансформации внутренней кинетической энергии $\overset{<}{\boldsymbol{\omega}}$ [с$^{-1}$] под действием внешних массовых сил $\vec{f}$ [Н = кг·м/с^2] и поверхностных напряжений $\overset{\wedge}{\boldsymbol{f}}$ [Н·м^2= кг·м^3/с^2]. Сопряженный корпускулярный этап строится на пространстве тривекторов локальных скоростей $\overset{\wedge}{\boldsymbol{\upsilon}}$ [м^3/с] с деформированными ячейками-корпускулами $\overset{\wedge}{\boldsymbol{\varepsilon}}$ [м^3] для обратного интерполирования – вторичного интегрирования напряжений $\overset{<}{\boldsymbol{\sigma}}$ [кг·м^2/с^2] с учетом реологических параметров сплошной среды:

$$\overset{<}{\boldsymbol{\sigma}} = (\overset{\wedge}{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\overset{\vee}{\boldsymbol{\kappa}} + \overset{\wedge}{\boldsymbol{\upsilon}}\cdot\overset{\vee}{\boldsymbol{\eta}})\times\lambda\,, \qquad [\text{Н}\cdot\text{м}]$$

где $\overset{\vee}{\boldsymbol{\kappa}}$ [Н/м^3] – тензор модуля упругой деформации; $\overset{\vee}{\boldsymbol{\eta}}$ [Н·с/м^3] – тензор вязкости; λ [м] – масштабный параметр, характеризующий дистанцию между взаимодействующими корпускулами.

Разделение вычислений по физическим процессам, таким образом, строится на дифференцирующих разностях первого порядка во времени как для континуального этапа расчетов на неподвижной сетке Эйлера, так и для корпускулярного, с активно взаимодействующими свободными частицами Лагранжа. Последовательное сопряжение расчетных этапов приводит к искомому интегрированию уравнений движения второго порядка для нестационарных процессов гидромеханики в функции времени: t [с] – как единого скалярного аргумента.

Формализация проектирования алгоритмов вычислительного эксперимента определяется реологией моделируемой жидкости и наличием перетоков внутренней энергии, что обусловливается произведениями тензоров конвективных скоростей и деформаций с анизотропными вязкими и упругими характеристиками сплошной среды. В случае квази-гиперболических вычислительных моделей на континуальном этапе в расчетах силовых воздействий задействуются тензоры упругих деформаций. Тогда на корпускулярном этапе изменяется внутреннее состояние числовых ячеек, где деформации в целом согласуются с приращениями локальных скоростей.

Алгоритмические методы для числовых объектов – узлов и ячеек

Рациональность и эффективность вычислительного эксперимента для моделирования прикладных задач механики сплошных сред обусловливается возможностью построения численных схем. В этих схемах состояние каждого числового объекта оценивается строгими математическими зависимостями внутренней механики и динамики свободных смещений только для ближайших или смежных пространственных ячеек и образуемых ими свободных частиц – корпускул окружающего континуума [Bogdanov, Khramushin, 2016]. В аспекте вычислительных алгоритмов это явные численные схемы, формализующие весьма сложные физические процессы в локальных пространствах, где математическое моделирование может управляться или перенастраиваться по критериям функционального контекста – в зависимости от изменения режима деформаций и агрегатного состояния моделируемой сплошной среды.

Алгоритмические методы функционального программирования для базовых числовых объектов образуются комплексом вычислительных операций тензорной математики [Degtyarev, Khramushin, 2016], строго и однозначно определяющих линейные интерполяционные пространства в построениях прямых и обратных задач гидромеханики (и математической физики) на аппроксимационных множествах смежных сеточных узлов и ячеек (корпускул).

Ускорение вычислений достигается построением явных численных схем, для чего требуется изначальный пересмотр физической сути прикладной задачи, с обеспечением естественного распараллеливания вычислений. Адекватность результатов вычислительного эксперимента также оценивается возможностью автоматического выбора оптимальных алгоритмов по критериям оценки состояния моделируемой среды в окрестностях всех числовых объектов.

В рамках объектно-ориентированного программирования на алгоритмических языках **`C++`** или **`D`** отчасти возможно автоматическое приведение векторных и тензорных типов данных и операций с ними к естественно-математической нотации. Как вариант, вычислительное пространство строится на трехмерном множестве **`Space`** нерегуляризованных узлов **`Point`** в индексируемой последовательности сеточных ячеек **`Volume`** для трехмерной интерполяции с опорой на локальные Евклидовы базисы **`Base`**, внутри и в окрестности которых строится математика согласования физических законов с использованием свободных векторов Vector [Degtyarev, Khramushin, 2016].

Перегрузка алгоритмических операций допускает особые правила манипуляции числовыми объектами. Так, разность величин типа **`Point`** дает локальный отсчет **`Vector`**, а сложение объектов **`Vector`** с величинами **`Vector`** или **`Point`** приводит к аналогичным геометрическим объектам **`Vector`** или **`Point`**.

Базовый объект **`Matrix`**, как простая матрица с размерностью `[3x3]` включается в комплексный числовой объект **`Tensor`** с предвычисленными обратными матрицами и собственными векторами, и включаются в состав ссылочных структур **`Cell`** с контекстными связями со смежными узлами и ячейками для адаптации к свойствам реальной сплошной среды.

Континуально-корпускулярное интерполяционное пространство **`Volume – Space`** отображается динамически перестраиваемыми сеточными узлами и ячейками – частицами, с которыми ассоциированы скалярные, векторные и/или тензорные физические величины – числовые объекты, предопределяющие густоту сеточного покрытия в зависимости от градиентов и локальной кривизны функций распределения параметров состояния моделируемой сплошной среды и, по возможности, с учетом необходимости прогноза трансформации гидродинамических потоков на следующих шагах во времени. Как вариант:

1. По ходу вперед на первом континуальном этапе выполняется рекурсивная перестройка густоты расчетной сетки по требованиям гладкости аппроксимации физических параметров, в том числе с экстраполяционным уточнением граничных условий.

2. На обратном корпускулярном проходе выполняется ускоренный поиск и учет механического взаимовлияния смежных числовых ячеек, моделируемых с помощью свободных диполей и поверхностных вихреисточников в качестве элементарных поляризованных частиц.

Моделирование подвижных корпускул возможно с помощью функции Н. Е. Жуковского для обтекания частиц – диполей: $M = 2\pi \cdot r_0^3 \cdot v_\infty = 1.5 \cdot \Omega \cdot v_\infty$, вовлекающих в движение присоединенные массы окружающей жидкости, отвечающие за активное силовое взаимодействие смежных частиц [Храмушин, 2005]. Законы взаимодействий могут быть представлены алгоритмическими методами, где функция **one_2** для плоского, и **one_3** – трехмерного пространственного потока:

```
Real one_2( Real r ){ return r<1 ? 2-r*r : 1.0/(r*r); }      // 2^2
Real one_3( Real r ){ return r<1 ? 2-r*r*r : 1.0/(r*r*r); } // 3^3
Vector dipole( Vector M,          // дипольный радиус первого критического узла
               Vector V )         // вектор из удаленной точки к центру частицы
{ Real W=norm( V );
  return ( 0.5*( V*(M*V) ) - V*(M%V) )*one_3( sqrt( W/norm(M) ) )/W;
}
Vector dipole_flow( Vector M, Vector V )            // совместное действие
{ Real W,R=one_3( sqrt((W=norm( V ))/norm( M ))); // с набегающим потоком
     return ( V*( 1.0-R )*( M%V ) + V*( 1.0+0.5*R )*( M*V ) ) / W;
}
```

Заключение

В настоящем исследовании формулируются и отчасти обосновываются базовые геометрические закономерности и интерполяционные зависимости, образующие основу для построения второго корпускулярного этапа вычислительного эксперимента в механике сплошных сред, в котором свободные поляризованные корпускулы интерпретируются в рамках предельно простых моделей пространственных диполей и вихреисточников. Обосновываются предложения о введении специальных вычислительных операций-функций, без прямых математических аналогов, однако имеющих вполне однозначный смысл в моделировании пространственных процессов и физических явлений в составе весьма строгих алгоритмов или методов – функций объектно-ориентированного программирования.

Список литературы

Богданов А. В., Дегтярев А. Б., Храмушин В. Н. Трехмерная тензорная математика вычислительных экспериментов в гидромеханике // Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Серия «Механика, управление, информатика». Часть 3. Сборник трудов ИКИ РАН 17–19 ноября 2015 г. Россия, Таруса, Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Щура, стр. 34-48.

Bogdanov A., Degtyarev A., Khramushin V. Trekhmernaya tenzornaya mathematika vychislitelnykh experimentov v gidromechanike [Three-dimensional tensor mathematics for fluidmechanics computational experiments] // Computing technology in the natural sciences. Methods of supercomputer simulations. "Mechanics, Controls, Computer Science" series. Part 3: Proceedings of the Space Research Institute 17-19 November 2015 Russia, Tarusa, Ed. Nazirova R., Schur L., pp. 34-48.

Bogdanov A. V. and Khramushin V. N. Tensor Arithmetic, Geometry and Mathematical Principles of Fluid Mechanics in the Implementation of Direct Computational Experiments // The European Physical Journal Conferences 02/2016; 108(02013): 6 p. DOI: 10.1051/epjconf/201610802013.

Degtyarev A.B. and Khramushin V.N. Coordinate Systems, Numerical Objects and Algorithmic Operations of Computational Experiments in Fluid Mechanics // The European Physical Journal Conferences 02/2016 108(02018): 6 p. DOI: 10.1051/epjconf/201610802018.

Храмушин В. Н. Трехмерная тензорная математика вычислительных экспериментов в гидромеханике. – Владивосток: ДВО РАН, 2005. – 212 с.

Khramushin V. Trekhmernaya tenzornaya mathematika vychislitelnykh experimentov v gidromechanike [Three-dimensional tensor mathematics for fluidmechanics computational experiments] – Vladivostok: FEBRAS, 2005. – 212p.

Features of physical distribution processes modeling in continuum-corpuscular computational experiments

A. V. Bogdanov[1], A. B. Degtyarev[1], V. N. Khramushin[2,a]

[1] Saint-Petersburg State University

[2] Sakhalin division of Science-technical society of shipbuilders named Alexey Krylov, Yuzhno-Sakhalinsk

E-mail: [a] Khram@mail.ru

Abstract. The principles of the separation of computational processes in the implementation of direct computational experiments by the direct continuous-corpuscular simulations in continuum mechanics and corpuscular physical spaces. Efficient algorithms for applied problems solving consist when considering a comprehensive architectural features of the computing systems in aggregate with the engineering representation physical entities of simulated processes and phenomena. This studying is devoted to spatial approximation for constructing with numerical algorithms supplement a free polarized interacting corpuscles in simulations processes, which adjacent only with nearest spatial nodes to forming a conjugates cells in the medium of continuous particles.

Keywords: tensor mathematics, algorithm, numerical objects, computational experiment, finite volumes, polarized corpuscles, fluidmechanics

The work was partly supported by Alexey Krylov Science-engineering society of shipbuilder from Sakhalin division,
St. Petersburg State University (project N 0.37.155.2014), Russian Foundation for Basic Research (projects N 16-07-01111, 16-07-00886, 16-07-01113)