КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2015 Т. 7 № 3 С. 767−774

Ки&М

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

УДК: 004.94

Алгоритмическое построение явных численных схем и визуализация объектов и процессов в вычислительном эксперименте в гидромеханике
(Пространственные объекты тензорной геометрии для аппроксимации элементарных деформируемых частиц и моделирования операций вычислительной гидромеханики)

А. Б. Дегтярев, Т. Р. Ежакова[a], В. Н. Храмушин

Санкт-Петербургский государственный университет,
Россия, 198504, г. Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский просп., д. 35

E-mail: [a]t.r.ezhakova@gmail.com

Получено 28 октября 2014 г.

В работе рассматриваются проектные и поверочные этапы, в разработке сложных вычислительных алгоритмов для создания прямых вычислительных экспериментов в гидромеханике. В моделировании физических полей и нестационарных процессов механики сплошных сред желательно опираться на строгие правила конструирования числовых объектов и связанных с ними вычислительных алгоритмов. Синтез адаптивных числовых объектов и эффективных арифметико-логических операций может послужить оптимизации всей вычислительной задачи, при условии строго следования и соблюдения исходных законов гидромеханики. Возможность использования троичной логики позволяет разрешить некоторые противоречия функционального и декларативного программирования в реализации чисто прикладных задач механики. Аналогичные проектные решения приводят к новым численным схемам тензорной математики, которые позволяют оптимизировать эффективность и обосновывать корректность результатов моделирования. Наиболее важным следствием является возможность использования интерактивных графических методов для визуализации промежуточных результатов моделирования, а также для управляемого воздействия на ход вычислительного эксперимента под контролем инженеров аэрогидромехаников–исследователей.

Ключевые слова: тензорная математика, метод крупных частиц, гидромеханика, вычислительный эксперимент, проектное решение, поверочная задача

Исследования выполняются при поддержке грантов РФФИ (№ 13-07-00747), СПбГУ (№ 9.38.674.2013, № 0.37.155.2014) и Комплексной программы ДВО РАН «Дальний Восток» (№ 15.3312-III-CO-08-023) на базе оборудования «Вычислительный центр СПбГУ».

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2015 Т. 7 № 3 С. 767−774

Ки&М

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

Algorithmic construction of explicit numerical schemes and visualization of objects and processes in the computational experiment in fluid mechanics
(Spatial geometry methods for tensor approximations of elementary deformable particles and for numerical modeling in computational fluid mechanic)

A. B. Degtyarev, T. R. Yezhakova,V. N. Khramushin

Saint Petersburg State University, 35 University ave., Peterhof, St. Petersburg, 198504, Russia

The paper discusses the design and verification stages in the development of complex numerical algorithms to create direct computational experiments in fluid mechanics. The modeling of physical fields and non-stationary processes of continuum mechanics, it is desirable to rely on strict rules of construction the numerical objects and related computational algorithms. Synthesis of adaptive the numerical objects and effective arithmetic-logic operations can serve to optimize the whole computing tasks, provided strict following and compliance with the original of the laws of fluid mechanics. The possibility of using ternary logic enables to resolve some contradictions of functional and declarative programming in the implementation of purely applied problems of mechanics. Similar design decisions lead to new numerical schemes tensor mathematics to help optimize effectiveness and validate correctness the simulation results. The most important consequence is the possibility of using interactive graphical techniques for the visualization of intermediate results of modeling, as well as managed to influence the course of computing experiment under the supervision of engineers aerohydrodynamics–researchers.

Keywords: tensor mathematics, large particles, fluidmechanics, computational experiment, design, verifying

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2015, vol. 7, no. 3, pp. 767–774 (Russian).

Современное становление вычислительной архитектуры предъявляет повышенные требования к теоретической стройности, оптимальности и обоснованности выбора разнородных функциональных средств и графических инструментов для создания специализированных прикладных программ; требующих согласованности в логическом синтезе фундаментальных законов физики с их алгоритмическим представлением при унифицированном построении прямых вычислительных экспериментов, востребованных в соответствии со сценариями практического применения инженерных вычислительных систем — их интерактивных и динамически формируемых графических отображений.

1. Проектные и поверочные этапы

Проектные и поверочные этапы в разработке прикладных вычислительных комплексов для моделирования физических полей механики сплошных сред должны быть основаны на логической независимости методов представления элементарных числовых объектов-структур и операций с ними в составе больших числовых массивов, вовлекаемых в явные численные алгоритмы и контекстно-зависимые — рекурсивные функции для построения исходных физических полей, собственно моделирования и последующей визуализации результатов прямого численного моделирования нестационарных гидромеханических процессов и явлений.

В процессе проектирования и построения сложных моделирующих систем средствами формализованных языков программирования, в отличие от нечетких деклараций естественных языков, обязательно следование строго означенным алгоритмическим процессам с соблюдением функциональных зависимостей для моделируемых физических законов и явлений, формализуемых сложными структурами числовых данных и контекстно-зависимыми операциями над ними. Любой разлад формальной логики или последовательности алгоритмических операций, приведет исходные инженерные разработки к невыносимо трудной отладке программных комплексов либо к приведению разрозненных пакетов процедур в состояние неустранимых несоответствий между вычислительными объектами и связанными с ними операциями в целом. Рассмотрим особенности проектных построений для реализации новых алгоритмов вычислительной гидромеханики.

Непротиворечивое авторское изложение какой-либо идеи может стать вполне состоятельным, если для внешне разнородных понятий в описании природных явлений удается ввести специальные определения или особые сущности, достаточные для взаимно однозначного позиционирования или связывания всех смысловых или содержательных противоречий. В терминах троичной логики (трилектики[1]) предложения естественного языка оперируют диалектически разделенными сущностями, такими как подлежащее и сказуемое, которые связываются определениями, дополнениями и контекстно независимыми обстоятельствами.

В среде гидромеханического вычислительного эксперимента аналогичные понятия представляются числовым «объектом–явлением» и «операцией–действием», с которыми однозначно связываются геометрические «трансформации–алгоритмы» и физические «законы–функции», по аналогии существующие в обстоятельствах контекстно-зависимой среды исполнительных «алгоритмов» и множества «функциональных зависимостей».

На рис. 1 приведена схема построения вычислительного эксперимента в виде трех уровней аппаратной и языковой поддержки различных методов программирования, создаваемых по принципу «от множества расчетных алгоритмов к унифицированной функциональной среде» [Храмушин, 2005], ориентированной на внутренний контроль и согласование реологических свойств жидкости, и автоматизированную численную реализацию законов механики сплошной среды. Главные направления проектных исследований: «Проект» — согласование исходной задачи и ожидаемых результатов в избранной языковой среде; «Развитие» — этапы трансфор-

[1] «…Мудрый подход — китайская трилектика срединного пути, когда в логике научного поиска существуют как оппозиции, так и третьи позиции, оценивающие обстоятельства искомого выбора…»

мации моделируемых процессов аэрогидромеханики как при реализации поисковой, так и поверочной задачи; по взаимно ортогональной оси ① — «Явление» — детальное описание физических законов и реологии сплошной среды.

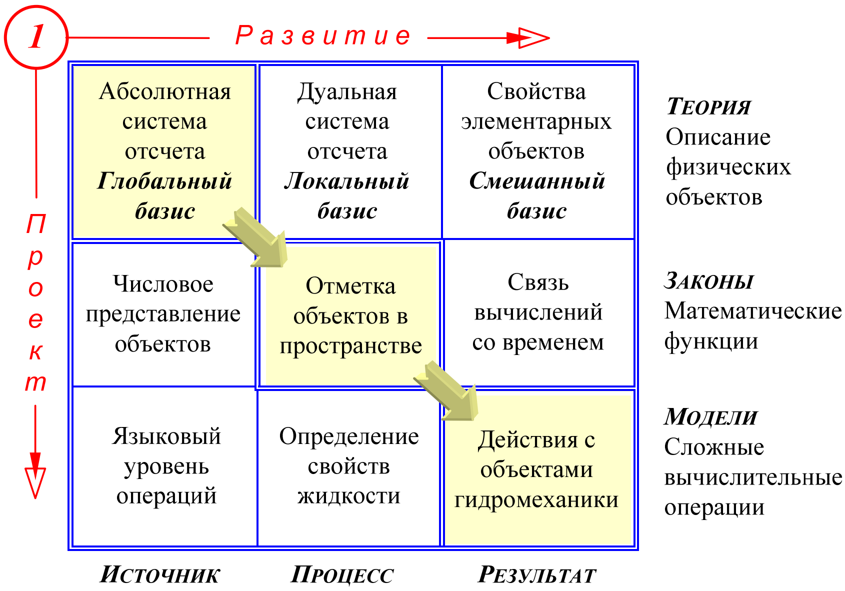

Рис. 1. Структура троичной матрицы, определяющей взаимосвязь проектных элементов для построения алгоритмов вычислительной гидромеханики с указанием условно применяемых к ним математических операций и логики пространственно-временных преобразований

2. Логическое построение математической модели

В предметной области ① — «Проект»–«Развитие» — конструируется компьютерное представление «Законов механики» на взаимно ортогональных основаниях «Математических моделей» и «Языков программирования», что в зависимости от типа проектных поисков в анализе «сверху вниз» по аналогии с частями речи будут выступать в качестве моделируемых объектов (существительных) и операций на ними (глаголов) и наоборот — как предопределенные действия (подлежащие) над изменяемыми данными (сказуемыми), при проектном синтезе «снизу вверх». Аналогичное встречное (виртуальное) проектирование алгоритмов допускается в компиляторах машинно-зависимых декларативных языков и отображается функциональными дополнениями (искусственным интеллектом) для интерактивного управления вычислительным экспериментом с автоматическим выбором гибридных численных схем или асимптотических решений в критических зонах.

По аналогии в определениях троичной логики выстраиваются числовые объекты — структуры данных и методы их обработки — алгоритмы и функции для реализации прямых вычислительных экспериментов в гидромеханике с использованием трехмерной тензорной математики. Ближайшим аналогом по постановке вычислительного эксперимента является метод крупных частиц [Белоцерковский, Давыдов, 1982], в котором замыкание проектных решений образуется этапами разделения задачи по физическим процессам континуально-корпускулярного подхода, что выражается в последовательном использовании математических моделей течения жидкости в эйлеровом представлении на неподвижной сетке и в лагранжевом смещении свободных деформируемых частиц жидкости.

В тензорной математике определяется строгий и однозначный метод записи состояния крупной частицы сплошной среды [Храмушин, 2005], обладающей свойствами сжимаемости, вязкости и упругости, с учетом ее динамической деформации во времени в соответствии с разностными схемами разложения для систем дифференциальных уравнений в частных производных, и в первую очередь с линейной интерполяцией между узлами (гранями) и центрами масс дискретных ячеек в числовых массивах для представления неразрывных физических полей.

Построение алгоритмических операций и функциональных зависимостей для реализации прямых вычислительных экспериментов в гидромеханике ведется с учетом привязки координатных базисов; при явном задействовании физических размерностей в контроле состояния моделируемой сплошной среды; при построении преимущественно явных численных схем с разделением этапов решения по естественным физическим процессам, допускающим наглядную визуализацию моделируемых свойств и потоков жидкости, и, как следствие, возможность задействования сложных функциональных зависимостей или инженерных решений в подобластях с проблемными или особыми условиями существования моделируемой сплошной среды.

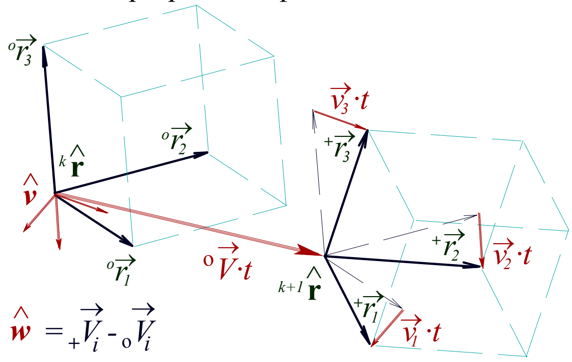

Рис. 2. Тензор локальных скоростей образуется поступательными и деформационными смещениями базисных векторов крупной частицы жидкости за расчетный интервал времени

В формализованной теории это сводится к правилам алгоритмического конструирования геометрических и естественно-физических операций с предопределенным физическим содержанием, что существенно ограничивает допустимое множество арифметических действий в трехмерной тензорной математике в отличие от многовариантности операций в базовых разделах тензорного исчисления с элементами аналитической геометрии и линейной алгебры.

3. Определение физических объектов и базовых вычислительных операций

Формальное построение физических объектов и операций в тензорной математике [Храмушин, 2005] приводит к строгим определениям для своеобразной модели мира вычислительной гидромеханики: 1) континуально-корпускулярная вычислительная модель метода крупных частиц в тензорной записи сводится к двойной линейной разностной интерполяции физических полей (*вместо интегрирования уравнений движения второго порядка*); 2) пространственное движение и взаимодействие крупных частиц жидкости описывается операциями произведения, что более соответствует физике процессов гидромеханики (*нет ограничений по малости дифференциальных приближений*); 3) возможность использования явных численных схем и дискретных полей с заданными физическими свойствами служит повышению эффективности прямых вычислительных экспериментов и дает возможность контроля корректности, и, по необходимости, задействования гибридных схем для достижения адекватных инженерных результатов моделирования.

Закон движения для частицы сплошной среды: $\vec{F} = \overset{>}{M} \cdot \vec{W} = \hat{r} \cdot \check{\rho} \cdot \vec{W}$; [Н]

Тензор вязких напряжений: $\overset{>}{f}_{н} = \nu_{н} \cdot \hat{\eta} / \Lambda = \nu_{н} \cdot \overset{>}{\eta} \cdot / \overset{>}{\Lambda}$; [Н/м]

Тензор упругих напряжений: $\overset{>}{f}_{\Gamma} = (\hat{r} + \hat{\nu}_{\Gamma} \cdot t) \cdot \check{c} / \Lambda \;=\; (\overset{\times}{1} + \overset{>}{\nu}_{\Gamma} \cdot t) \cdot \overset{>}{c} / \Lambda$, [Н/м]

где тензор локальных скоростей: $\hat{\nu} = {}_{+}\vec{V}_i - {}_{o}\vec{V}_i$ (рис. 2); реологические тензоры: $\overset{>}{M} = \hat{r} \cdot \check{\rho}$ [кг] — тензор массы — инерции; $\hat{r}$ [м^3] — тензор формы; $\check{\rho}$ [кг/м^3] — «условная плотность» для сохранения предыстории девиаций — внутренних «живых сил» крупных частиц жидкости; $\overset{>}{\eta}, \overset{>}{c}$ — тензоры динамической вязкости [кг/с] и жесткости [кг] реальной жидкости, Λ — дистанция ближнего взаимодействия смежных частиц.

Вычислительная модель содержит все три реологических свойства жидкости: сжимаемость, вязкость, упругость, при этом соотношение интенсивностей указанных напряжений может привести к критическому режиму с образованием струй, вихревых слоев и кавитационных разрывов. Под действием тензора внутренних напряжений частица жидкости получает приращение скорости внутреннего (замкнутого) движения:

$$\check{f} = \check{\varepsilon}\cdot \check{\vec{v}}_0\cdot t + \check{\mu}\cdot \check{\vec{v}}_H + \check{c}\cdot \check{\vec{v}}_\Gamma\cdot t = \check{f}_0 + \check{f}_H + \check{f}_\Gamma,$$

где тензоры $\check{f}_0$ — давление, $\check{\varepsilon}$ — коэффициент сжатия. Динамические коэффициенты $\check{\mu}, \check{c}, \check{\varepsilon}$ отличаются от кинематических исключением величины скалярной плотности ρ.

Тензор внутренних напряжений в локальной системе отсчета представляется характеристическим полиномом для оценки внутреннего состояния крупной частицы жидкости, где реологические параметры проявляются в виде главных инвариантов тензора конвективных скоростей:

$\vec{v}_0$: $\mathbf{I} \neq 0$ — сжимаемость → *кавитационный разрыв плотности*;

$\vec{v}_H$: $\mathbf{II} \neq 0$ — поворот → *образование свободной струи или турбулентного вихря*;

$\vec{v}_\Gamma$: $\mathbf{III} \neq 0$ — деформация, чистая — если другие инварианты тензоров равны нулю.

К примеру, если расчетная ячейка с присоединенным вихрем обращает в нуль детерминант внутреннего поля конвективных скоростей в смежной точке, в точке центра масс свободной сопряженной частицы жидкости, то можно воспользоваться алгоритмом переноса вихря с исходного эйлерова этапа вычислений в тензор «массы» сопутствующего лагранжевого этапа, что предопределит зарождение свободного турбулентного вихря внутри крупной частицы жидкости. Такой гибридный алгоритм можно использовать в том числе за пределами аппроксимационного разрешения на относительно грубых сетках, а для получения уточненного решения сеточная область в зоне вихреобразования может быть сгущена.

4. Реализация континуально-корпускулярных алгоритмов гидромеханики

Интерполяционные сеточные пространства с раскрепощенными для движения вычислительными объектами обусловливают суть вычислительных алгоритмов — этапов моделирования.

Прямые вычислительные эксперименты в гидромеханике на основе метода крупных частиц традиционно строятся исключительно с использованием прямоугольных ортогональных сеток. Исходя из аппроксимационных критериев может определяться минимальный шаг расчетной сетки в каждой локальной подобласти, что усложняет лишь рекурсивные функции автоматической переадресации пространственных координат расчетных ячеек с переинтерполяцией физических полей по дискретным узлам нерегуляризованных матричных массивов, и особо не перегружает вычислительные ресурсы на лагранжевых этапах со свободными частицами жидкости:

$$\{R\} = {}_{ijk}^{\;n}R,$$

как определение индексируемой регулярной сеточный области $\{i, j, k\}$, где нижние левые индексы задают пространственное местоположение: $\{X, Y, Z\} = \{i\cdot x, j\cdot y, k\cdot z\}$; а верхний левый индекс соответствует текущему циклу вычислительного эксперимента в отсчетах физического (моделируемого) времени $T = n\cdot t$.

В объектно ориентированном языке программирования С++ на уровне синтаксического разбора операторов возможно применение виртуальной перегрузки операций доступа к конкретным числовым объектам в сложной сеточной области, что может использоваться для адаптивных нерегуляризованных сеток (рис. 3) с пропусками узлов ${}_{ij}R$ и цельными ячейками — частицами: ${}_{ij}M$. Отчасти такие алгоритмы усложнят выбор и увеличат время доступа к конкретным числовым объектам, в то же время создается возможность оптимизации и значительного ускорения общего цикла вычислений и, что не менее важно, сохранения унификации вычислительных моделей механики сплошных сред, вплоть до простого алгоритмического перестроения внутренних и внешних граничных условий с помощью сглаживающих или экстраполяционных алгоритмов, в зависимости от аппроксимационных возможностей и доступности смежных числовых объектов.

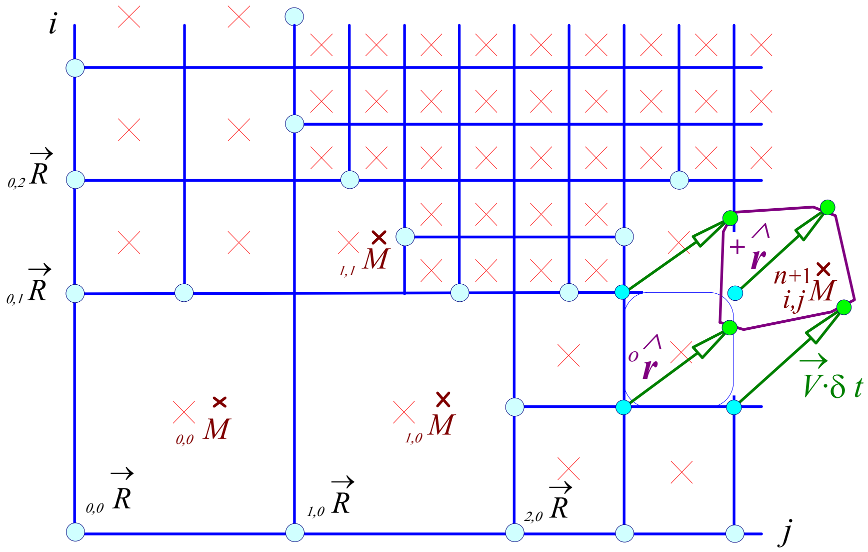

Рис. 3. Прямоугольная ортогональная нерегуляризованная сеточная область

При такой организации расчетной области местоположение крупных частиц жидкости ${}_{ij}M$ не обременяется смежными ортогональными связями для непосредственного применения разностного дифференцирования, что формально предопределяет возможность задействования этапа моделирования по Лагранжу, где формально независимые частицы участвуют в свободном и ускоренном движении по криволинейным траекториям в зависимости от их внутренней энергии (живых сил), аккумулированной в форме условной тензорной массы ${}_{ij}M$ (плотности).

5. Элементарные числовые объекты

Элементарные числовые объекты [Программа построения числовых объектов…, Роспатент № 2013619727] конструируются для выполнения строго определенного и ограниченного количества операций над числовыми объектами типа

```
typedef struct { token s; int d } integer; // — индексы и дискретные отсчеты,
typedef struct { token s; double d } real; // — скалярные физические величины,
```

где: `s` – формализованный элемент, использующийся для автоматического применения конвертирующих или адаптирующих операций по ходу вычислительного эксперимента. Скалярные числовые объекты служат для индикаторов времени и других инвариантных величин:

```
real T; // отсчет времени от начала вычислительного эксперимента,
real t; // шаг во времени для моделирования нестационарных процессов.
```

Векторные величины определяют точку как свободный вектор в пространстве:

```
typedef struct {Real X,Y,Z;} Point; // в абсолютной системе отсчета,
typedef struct { real x,y,z; } point; // внутри частицы жидкости
```

Крупная частица жидкости определяется с помощью числовой матрицы — тензора:

```
typedef struct { point x,y,z; } tensor; // свободный локальный базис,
typedef struct { Point R,X,Y,Z; } cell; // его видимость извне как ячейки.
```

Производные числовые структуры тензорной математики:

```
typedef struct { Point A; real x,y,z; } Vector; // с привязкой,
typedef struct { Point A; point x,y,z; } Basis; // местоположения.
```

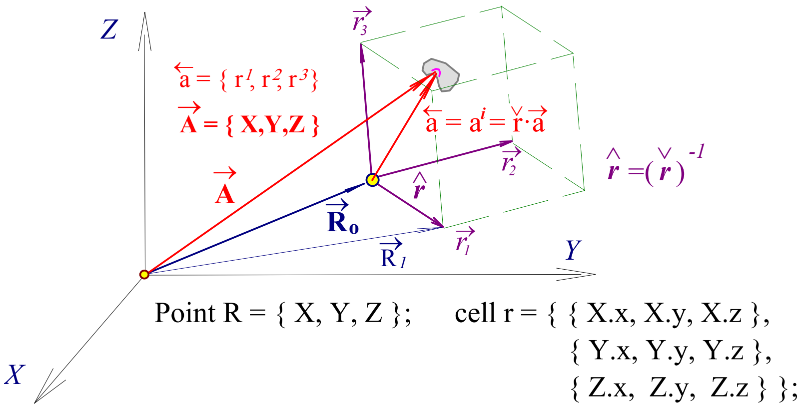

Рис. 4. Программное и пространственное представление элементарной частицы жидкости

Тензорные вычислительные операции относятся к тетраэдру базисных векторов (рис. 4), в которых все кинематические характеристики и свойства жидкости изменяются линейно. Изнутри деформированные параллелепипеды представляются ортонормированными базисами.

Заключение

Оптимальным по сложности инструментарием для проектирования вычислительных экспериментов можно признать алгоритмы трехмерной тензорной математики, где все числовые объекты идентичны представлениям в однородных координатах для визуализации вычислительных процессов в типовой графической среде типа OpenGL, задействующей визуализацию на параллельно работающих графических станциях. Создаются условия для контролируемого моделирования сложнейших явлений и процессов в гидроаэромеханике на основе интерактивного управления вычислительными процессами и автоматической адаптации численных схем.

Список литературы

Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М. Метод крупных частиц в газовой динамике. — М.: Наука, 1982. — 370 с.

Программа построения числовых объектов и функций трехмерной тензорной математики для вычислительных экспериментов в гидромеханике (Tensor). — СПбГУ, Роспатент № 2013619727.

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