

ТРЕХМЕРНАЯ ТЕНЗОРНАЯ МАТЕМАТИКА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ В ГИДРОМЕХАНИКЕ

А. В. Богданов, А. Б. Дегтярев, В. Н. Храмушин¹

Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ)

факультет Прикладной математики – процессов управления
кафедра компьютерного моделирования и многопроцессорных систем

Архитектура цифрового вычислительного комплекса определяет техническую основу унифицированного математического языка для строгого арифметико-логического описания явлений и законов механики сплошных сред для прикладных задач гидромеханики и физической теории поля. Совершенствование современных компьютеров стоит на пути вовлечения вычислительных операций в весьма вольные формализации множества локально-связных цифровых геометрических объектов, независимо существующих и трансформирующихся в окружении аналогичных виртуальных сущностей, и по совокупности моделирующих реальные взаимодействия смежных частиц сплошной среды. Глубокое распараллеливание вычислительных процессов служит возрождению на новом техническом уровне прикладного функционального программирования, обеспечивающего сквозной контроль вычислительных процессов с автоматическим применением разномасштабных гибридных схем и адаптивных математических моделей для достоверного воспроизведения фундаментальных законов физики и механики сплошных сред. Тензорная формализация числовых объектов и вычислительных операций служит пространственной интерполяции параметров реологического состояния и законов гидромеханики в качестве математических моделей в локальных координатах элементарных числовых ячеек – крупных частиц жидкости.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 13-07-00747-а) и Санкт-Петербургским государственным университетом (проект № 9.38.674.2013). Исследования проведены с использованием оборудования ресурсного центра «Вычислительный центр СПбГУ».

Ключевые слова: вычислительный эксперимент, тензорная математика, гидромеханика.

Основные обозначения:

$\overset{\wedge}{\mathbf{r}} = r_{ij} [\text{м}^3]$ – тензор формы крупной частицы жидкости;

$\underset{<}{\mathbf{v}} = \underset{\wedge}{\mathbf{v}} \cdot \underset{\vee}{\mathbf{r}} [\text{с}^{-1}]$ – тензор конвективных скоростей;

$\underset{\vee}{\rho} = \rho^{jk} [\text{кг/м}^3]$ – анизотропная динамическая плотность жидкости;

$\underset{>}{\mathbf{m}} = \underset{\vee}{\rho} \cdot \underset{\wedge}{\mathbf{r}} [\text{кг}]$ – объемная – инерционная масса виртуальной ячейки – частицы;

$\overset{\rightarrow}{\mathbf{f}} [\text{Н}]$ – массовые силы, распределенные по объему частицы жидкости;

$\overset{\wedge}{\mathbf{f}} [\text{Н} \cdot \text{м}^2]$ – тензор поверхностных напряжений на гранях ячейки-частицы;

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

¹ **Богданов Александр Владимирович** – доктор физико-математических наук, профессор, bogdanov@csa.ru

Дегтярев Александр Борисович – доктор технических наук, профессор, deg@csa.ru

Храмушин Василий Николаевич – кандидат технических наук, докторант, khram@mail.ru

ПРЕДИСЛОВИЕ

История становления CFD проходила в видении перспектив интенсивного роста вычислительных ресурсов и периодических оценок, сколько тера- или экзафлопс понадобится, чтобы решить все проблемы этой науки весьма архаичными математическими методами. На этом фоне резким диссонансом выглядели попытки российских ученых [5] вернуться к постановке вычислительной задачи на основе синтеза исходных физических принципов, подойти с новых позиций к проектированию вычислительных экспериментов и выходить на прямое моделирование течений. Это, однако, списывалось на нехватки вычислительной техники у таких исследователей, а все силы вновь и вновь бросались на создание морально устаревающих пакетов стандартных программ, с не всегда адекватными алгоритмами, и на создание далеких от инженерных видений инструкций по их использованию. То, что эти пакеты программ не всегда корректно описывали физическое явление и безвозвратно утрачивали связь с инженерными достижениями в архитектуре вычислительных систем, по инерции списывается не на нехватки ресурсов, и потому современные книги по CFD смотрятся именно как описания соответствующих стандартных программ без должной взаимосвязи с их прикладным предназначением. Впрочем, глубокий анализ чисто физических проблем в создании математических моделей и проектировании прикладных алгоритмов в CFD был выполнен еще в 1974 году [1].

Первые предостерегающие сигналы прозвучали в начале века, когда оказалось, что большинство стандартных программ, если и портируются на серверы с многоядерными процессорами, то, во всяком случае, очень плохо масштабируются. В настоящее время, когда все большие вычислительные комплексы гетерогенны, никаких идей по переносу на них стандартных CFD программ не просматривается. И причина этого понятна – задачи динамики элементарного объема и геометрические аспекты этой динамики так сильно завязаны, что в процессе вычислений на каждом такте необходимо обмениваться таким количеством разнородной информации, которое сравнимо со всеми обрабатываемыми данными. А этого ни один гибридный процессор не потянет. К настоящему времени стало очевидно недостаточность формального распараллеливания с помощью векторизации вычислительных потоков, что обусловлено необходимостью повсеместного контроля и гибридной перенастройки вычислительных процессов в зависимости от физического состояния моделируемых жидкостей. Развитие континуально-корпускулярных методов на основе российского «Метода крупных частиц» [2], приводит к вычислительным моделям тензорной математики с независимым контролем состояния каждой расчетной ячейки-частицы жидкости, вычислительные алгоритмы и функциональная логика синтеза физических явлений и процессов для которой обеспечивается параллельно работающими арифметико-логическими ядрами, что в точности соответствует тенденциям развития вычислительной техники по запросам графической визуализации трехмерных пространственных явлений и динамических процессов с ними. Именно использование тензорной алгебры для прямого моделирования физических явлений и процессов в составе обобщенной тензорной математики, позволяет эффективно синтезировать гидродинамические и геометрические аспекты вычислительного процесса в целом. Это давно поняли в теории поля. Такая программа для квантовой гравитации была намечена в [8], и блестяще реализована в [11]. Проблемы в CFD имеют ту же природу, поэтому естественно применять и здесь подход, основанный на тензорной математике, а построение алгоритмов для работы с тензорными числовыми объектами на современных гибридных системах реализуется естественным образом.

КЛЮЧЕВЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Алгоритмическая реализация прямого численного моделирования нестационарных процессов в гидромеханике с использованием явных схем имеет прекрасный исторический аналог в форме исчисления флюксий Исаака Ньютона, что в современных алгоритмах представляется числовыми объектами трехмерного пространства с виртуальными контекстными связями для реализации законов гидроаэромеханики и физической теории поля на основе операций тензорной математики.

Исчисление флюксий² создает основу классической механики Ньютона для движения в векторном пространстве и скалярном времени [8]. В кинематике первой флюксией становится скорость движения \vec{V} [м/с], как разностный дифференциал (*по Ньютону – момент*) в произведении с шагом во времени Δt или просто t [с]. Для подвижной точки \vec{a} [м⁻²], в замороженной в жидкость, кинематическое уравнение включает дифференциал (*момент*) скоростей движения и времени в единой абсолютной системе координат, так же как и внутри локального деформируемого базиса, связанного с конкретной крупной частицей жидкости – виртуальным числовым объектом³:

$${}^+ \vec{A} = \vec{R} + \vec{V} \cdot t + \vec{a} \cdot (\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{v}} \cdot t) + \vec{\omega} \cdot (\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{v}} \cdot t) \cdot t, \quad [\text{м}] \quad (1)$$

где $\vec{\omega}$ – скорость смещения точки внутри частицы жидкости; ${}^+ \vec{A}$ – новое положение контрольной точки в абсолютной системе координат; \vec{R} – местоположение локального базиса в абсолютной системе координат; $\hat{\mathbf{v}}$ – тензор вращения и деформации базисных осей тензора формы $\hat{\mathbf{r}}$.

На сопряженном этапе вычислительного эксперимента используются обновленные пространственные поля скоростей и деформаций, необходимые для контроля динамического состояния и переопределения реологических характеристик жидкости в форме скалярных, векторных и тензорных неразрывных физических полей следующего расчетного интервала во времени. В современных интегральных вычислительных моделях аналогичные гидродинамические особенности ассоциируются с пространственными распределениями поляризованных дипольных ядер, с производными от них вихреисточниками на поверхностях разрыва сплошности или устойчивости течений реальной вязкой, упругой и сжимаемой⁴ жидкости.

² Флюенты (*fluens, fluentis – текущий*) – функции x, y, z по аргументу времени t ; Флюксии (*fluxio – истечение*) – $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$ производные x, y, z по времени t .

³ В скалярной записи:
 ${}^+ A_x = {}^o A_x + (V_x + v_{xx}a^x + v_{xy}a^y + v_{xz}a^z) \cdot t$;
 ${}^+ A_y = {}^o A_y + (V_y + v_{yx}a^x + v_{yy}a^y + v_{yz}a^z) \cdot t$;
 ${}^+ A_z = {}^o A_z + (V_z + v_{zx}a^x + v_{zy}a^y + v_{zz}a^z) \cdot t$.

⁴ В тензорной математике определяется реологические характеристики для вязкой и упругой жидкости, зависящие от скорости и величины локальной деформации, соответственно.

ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ ОБОБЩЕНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ОБЪЕКТОВ И СВЯЗАННЫХ АЛГОРИТМИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЙ

Геометрическое построение пространственной задачи включает скалярные, векторные и тензорные числовые объекты с определенным выбором алгоритмических процедур и арифметико-логических операций, в размерной физической форме и с привязкой числовых объектов к интерполяционным базисам в тензорном⁵ сеточном пространстве.

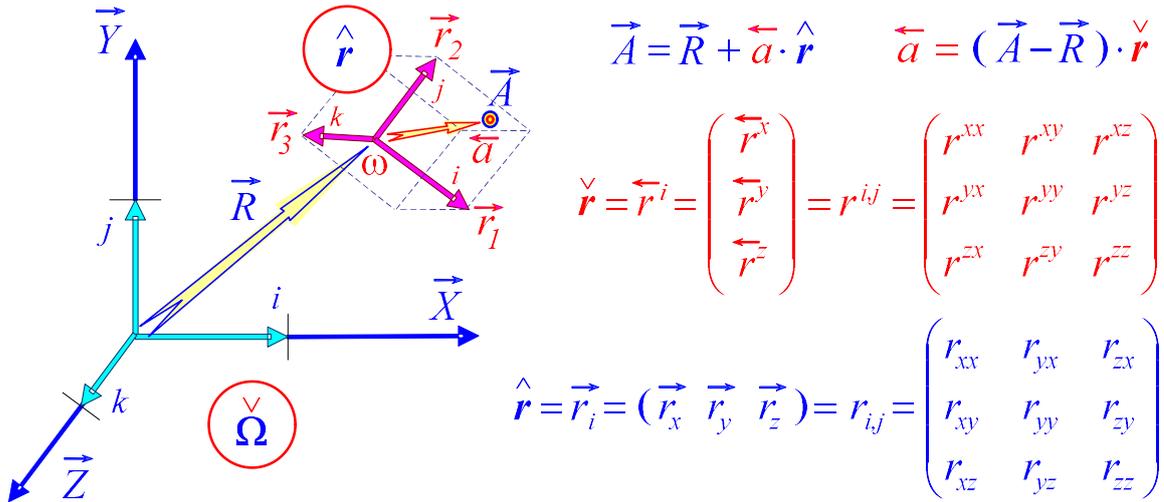


Рис. 1. Геометрия глобального сеточного пространства $\{\overleftarrow{\Omega}\}$ и множества локальных базисов $\{\hat{r}(\omega)\}$; i, j, k – единичные орты в связанной системе отсчета.

Элементарные числовые объекты образуются симплексами некопланарных базисных векторов (Рис. 1), используемых в качестве линейных интерполяционных операторов – разностных дифференциалов в трехмерном евклидовом пространстве \rightarrow

r_i и служат для построения неразрывных физических полей в окрестности смежных сеточных узлов $\overleftarrow{\Omega} \overleftarrow{R}$ и центров масс ω для сопряженных с ними крупных деформируемых и подвижных частиц сплошной среды. Произведение векторных и тензорных величин выполняются со сверткой – суммированием немых индексов в одночленном произведении⁶ $\overleftarrow{a} = \overleftarrow{a} \cdot \overleftarrow{r}$ или $a^j = a_i \cdot r^{ij}$ – при переходе в локальный базис, и обратно $\overleftarrow{a} = \overleftarrow{a} \cdot \overleftarrow{r}$ или $a_k = a^j \cdot r_{jk}$ – при возврате к абсолютным координатам (тензор локального базиса – справа от вектора).

– Левый верхний индекс отмечает текущее время, которое может обозначаться прописной буквой $\overleftarrow{\Omega}$ в абсолютном измерении, или расчетным шагом во времени

⁵ Тензорное или евклидово пространство внутри опирается на ортогональную декартову систему координат с ортами в масштабе исходных базисных векторов;

⁶ Тензорное произведение служит для смены сопряженных координатных базисов, или для изменения физических свойств пространственных числовых объектов.

${}^t\mathcal{R}$, или значками ${}^+\mathcal{O}$ и ${}^-\mathcal{O}$ – для ссылок на следующий или предыдущий интервал во времени;

– Левый нижний индекс – местоположение в сеточном пространстве $\{X,Y,Z\} \hat{\mathbf{r}}$, или ссылки на смежные узлы $\{+\} \hat{\mathbf{r}}$ или центров масс частиц жидкости $\{-\} \hat{\mathbf{r}}$ – на сопряженных этапах вычислительного эксперимента.

Правые индексы связывают векторные и тензорные компоненты в абсолютном и локальных базисах, что служит строгому определению динамики и деформации числовых ячеек – частиц сплошной среды.

– Нижние правые индексы, тензорный «домик» и стрелочка вправо показывают принадлежность единой абсолютной системе координат (Рис. 1). Тензор $\hat{\mathbf{r}} [m^3]$ собирается по столбцам из базисных векторов $\hat{\mathbf{r}}_i$ в матрице геометрических преобразований, типа $\hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{r}} [m]$.

– Верхние правые индексы – проекции внутри тривектора подвижной и деформируемой сеточной ячейки, где отображение ортов абсолютных координат ложится векторами-строками в матрице обратных координатных преобразований $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}^j = \hat{\mathbf{r}}^{jk} = \hat{\mathbf{r}}^{-1} [m^{-3}]$ отмечаемых тензорной «галочкой» и векторной стрелочкой влево $\hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{r}} [m^{-2}]$.

– Прописными буквами отмечаются большие числовые величины, измеряемые в масштабной шкале глобального пространства Ω , и единого абсолютного времени T ;

– Строчными – существенно малые величины или конечные разности, соизмеримые с физическими размерениями локальных базисов элементарных частиц сплошной среды ω , и в интервале текущего шага времени t .

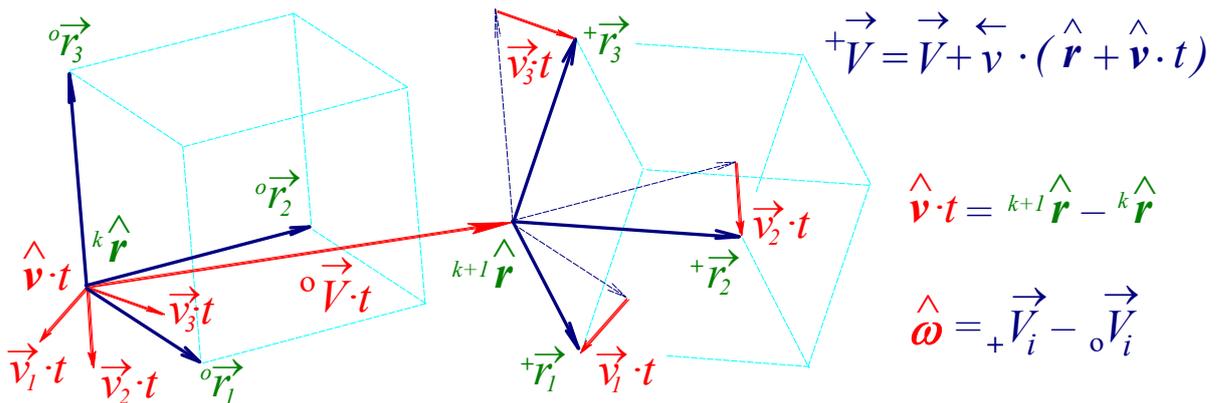


Рис. 2. Тензор изменения скоростей $\hat{\omega} [m^3/c]$ образуется деформационными движениями базисных векторов расчетной ячейки в пространстве, на фоне их смещения⁷ в пространстве $\hat{\mathbf{v}} \cdot t [m^3]$ за интервал времени $t [c]$.

⁷ Тензоры $\hat{\omega}$ и $\hat{\mathbf{v}}$ могут быть вырожденными, а их обращение – некорректно.

Абсолютное время T – может содержать Юлианскую дату и время от начала суток⁸ $kT = T + k \cdot t$, так же как и абсолютные отсчеты в пространстве⁹ $\vec{A} = \vec{R} + \vec{a} \cdot \vec{r}$ [м] – географические и другие обобщенные координаты. В сбалансированных численных схемах исключается необходимость вовлечения абсолютных отсчетов в пространстве $\vec{\Omega} \vec{R}$ и времени T , так как на всех этапах вычислений достаточно использования числовых величин в узлах и центрах масс сопряженных сеточных ячеек – виртуальных корпускул $\vec{r} = \vec{R} - \vec{R}$ [м³].

Кинематика внутренних потоков задается разностным тензором скорости (Рис. 2) по смещаемым во времени базисным векторам формы частицы жидкости:

$$\vec{v} \cdot \vec{t} = v_i \cdot \vec{t} = \frac{\Delta}{\Delta} \vec{r}_i = \frac{t}{+} \vec{r}_i - \frac{o}{\Omega} \vec{r}_i, \quad [M^3] \quad (2)$$

где тензор \vec{v} [м³/с] задает текущие скорости смещения базисных ортов частицы жидкости в локальном масштабе (*строчные буквы*), измеренные в проекции глобальной системы координат (*индексы снизу*). Преобразованием системы отсчета тензора скоростей¹⁰ к локальному базису крупной частицы жидкости (*геометрическая нормализация*) $\vec{v} = \vec{v} \cdot \vec{r}$ [1/с] получается независимый тензор конвективных скоростей, характеризующий локальное движение жидкости. Тензор \vec{v} [1/с] содержит расширенный набор кинематических элементов системы дифференциальных уравнений с перекрестными производными компонентами движения деформируемой частицы жидкости:

$$\vec{v} \cdot \vec{r} = \begin{pmatrix} v_{xx}r^{xx} + v_{xy}r^{yx} + v_{xz}r^{zx} & v_{xx}r^{xy} + v_{xy}r^{yy} + v_{xz}r^{zy} & v_{xx}r^{xz} + v_{xy}r^{yz} + v_{xz}r^{zz} \\ v_{yx}r^{xx} + v_{yy}r^{yx} + v_{yz}r^{zx} & v_{yx}r^{xy} + v_{yy}r^{yy} + v_{yz}r^{zy} & v_{yx}r^{xz} + v_{yy}r^{yz} + v_{yz}r^{zz} \\ v_{zx}r^{xx} + v_{zy}r^{yx} + v_{zz}r^{zx} & v_{zx}r^{xy} + v_{zy}r^{yy} + v_{zz}r^{zy} & v_{zx}r^{xz} + v_{zy}r^{yz} + v_{zz}r^{zz} \end{pmatrix}.$$

Иначе такое произведение можно представить в форме полного дифференцирования $\vec{v} = \vec{v} / \vec{r} = \frac{\Delta}{\omega} \vec{v}_i / \frac{\Delta}{\omega} \vec{r}_i$, исполняемого без искусственных исключений «малых» или конвективных элементов в приближениях субстанциональных производных, и при корректной физической интерпретации реологических характеристик жидкости и условий существования течений, с возможностью асимптотических или эмпирических уточнений численных моделей.

⁸ Истинное время задается числовой структурой **Event** с Юлианской датой: **D** (от 4713 г. до н. э.), и локальным временем в часах от начала суток: **T**.

⁹ В программной среде точки в глобальных координатах: **Point** – разделены со свободными векторами в локальных базисах: **Vector**, что унифицирует вычислительные операции с тензорными числовыми объектами: **Tensor** и **Basis**.

¹⁰ Запрет повышения ранга в операциях произведения позволяет использовать автоматические перестановки сомножителей в геометрических преобразованиях

$$\vec{v} \cdot \vec{a} = \vec{v} \cdot (\vec{a} \cdot \vec{r}) = \vec{v} \vec{r} \cdot \vec{a} = \vec{v} \cdot \vec{a} \quad [M/c].$$

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФОРМАЛИЗАЦИЯ КОНТИНУАЛЬНО-КОРПУСКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ГИДРОМЕХАНИКЕ

Тензорная математика¹¹ ориентирована на создание прямых вычислительных экспериментов в решении прикладных задач гидромеханики. Континуально-корпускулярный подход строится по численным схемам первого порядка с последовательным разностным интегрированием законов движения на сопряженных этапах по скалярному аргументу – времени. Разделение этапов вычислений по совокупным физическим процессам дает возможность сквозного контроля и гибридного перестроения математических зависимостей по текущим оценкам состояния моделируемой сплошной среды, с учетом интенсивности физического взаимодействия смежных корпускул – как виртуальных числовых объектов. Каноническое представление законов гидромеханики позволяет строго и однозначно связывать числовые объекты с арифметико-логическими операциями и сложными геометрическими алгоритмами, в том числе с использованием быстрых интерполяций для нерегуляризованных сеточных пространств.

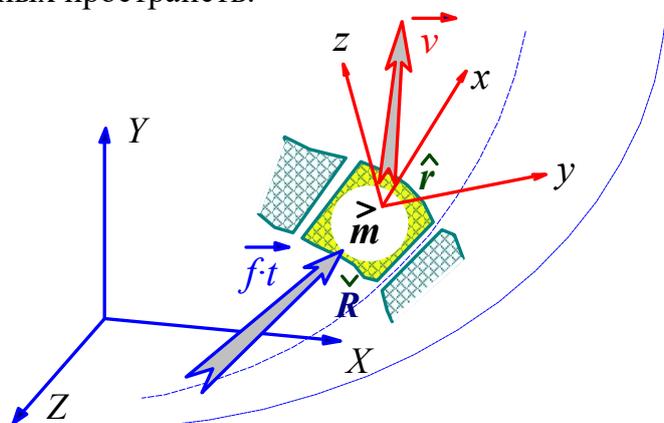


Рис. 3. Разделение этапов вычислений по физическим процессам включает тензорную массу $\overset{\triangleright}{m}$ в качестве геометрического оператора, корректирующего движение частиц жидкости по живым силам и инерции на сопряженных этапах моделирования во времени.

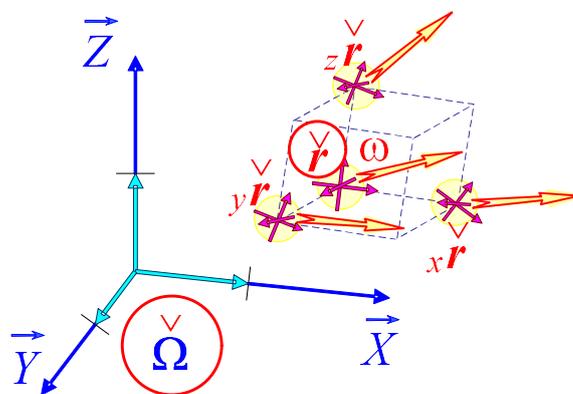


Рис. 4. На корпускулярном этапе вычислительного эксперимента выполняется оценка текущего реологического состояния сплошной среды в исходных узлах расчетной сетки

Последовательное пространственное интегрирование первого порядка задействует сеточные и корпускулярные подходы, формализуемые с помощью тензора инерционной массы $\overset{\triangleright}{m} = m^i_k$ [кг] в качестве числового объекта для фиксации предыстории – инерции в движении и локальной деформации моделируемых частиц жидкости, что образует алгоритмическую последовательность сбалансированного прогноза и коррекции движения по криволинейным траекториям частиц жидкости с динамически изменяющейся внутренней энергией.

Внешняя массовая сила в абсолютной системе координат \vec{f} [кг·м/с²] в векторной трактовке второго закона Ньютона представляется производной приращения количества движения (строчная буква в обозначении скорости) $\vec{v} \cdot \overset{\triangleright}{m} / t$ во времени:

¹¹ Математика – наука о количественных отношениях и пространственных формах действительного мира.

$$\vec{f} \cdot t = \vec{v} \cdot \vec{m} \quad [\text{кг} \cdot \text{м}/\text{с}].$$

На континуальном этапе вычислительного эксперимента (рис. 3, 4) [8] для каждого пространственного сеточного узла $\vec{\Omega} \vec{R}$ [м] уточняются векторные поля абсолютных \vec{V} [м/с] и локальных скоростей \vec{v} [м/с], находящихся в ближайших окрестностях расчетной ячейки \overleftarrow{a} [м⁻²] с учетом деформации и изменения внутренней кинетической энергии $\overleftarrow{\omega}$ [с⁻¹] под действием внешних массовых сил \vec{f} [кг·м/с²] и поверхностных напряжений \hat{f} [Н·м²], действующих в условиях активного влияния внутренней энергии и инерции $\vec{m} = \overleftarrow{\rho} \cdot \vec{r}$ [кг] конкретной частицы \vec{r} [м³] в произведении с тензором плотности $\overleftarrow{\rho}$ [кг/м³], формализующим предысторию действия объемной силы инерции и поверхностного комплекса живых сил – собственной внутренней энергии жидкой корпскулы:

$${}^+ \vec{A} = \vec{R} + \vec{V} \cdot t + \vec{m} \cdot \vec{f} \cdot t^2 / 2 + (\vec{r} + \vec{v} \cdot t + \vec{m} \cdot \vec{f} \cdot t^2 / 2) \cdot \overleftarrow{a}. \quad [\text{м}] \quad (3)$$

где ${}^+ \vec{A}$ [м] – местоположение точки в новый расчетный шаг во времени; \vec{R} [м] – исходное местоположение центра отсчета для числовой ячейки; \vec{V} [м/с] – скорость свободного движения частицы жидкости; \vec{f} [Н] – внешняя объемная сила; \hat{f} [Н·м²; кг·м³/с²] – тензор поверхностных напряжений, предопределенный из граничных условий. В случае использования специальных пространственно разнесенных сеточных шаблонов, интерполяционные поправки на локальное местоположение центра масс \overleftarrow{a} [м⁻²] могут стать пренебрежимо малыми.

Сопряженный корпскулярный этап вычислений получает обновленное кинематическое поле тривекторов локальных скоростей \hat{v} [м³/с] с уточнением деформационных смещений относительно подвижных корпскул $\hat{\varepsilon}$ [м³] для обратного интерполирования – вторичного разностного интегрирования (**Ошибка! Источник ссылки не найден.**) с фиксацией напряжений $\overleftarrow{\sigma}$ [кг·м²/с²] в ближайших окрестностях виртуальных числовых объектов:

$$\overleftarrow{\sigma} = (\hat{\varepsilon} \cdot \overleftarrow{\kappa} + \hat{v} \cdot \overleftarrow{\eta}) \times \lambda, \quad [\text{Н} \cdot \text{м}] \quad (4)$$

где $\overleftarrow{\kappa}$ [Н/м³] – тензорный модуль упругой деформации; $\overleftarrow{\eta}$ [Н·с/м³] – тензор коэффициентов вязкости; λ [м] – масштабный коэффициент, характеризующий дистанцию между взаимодействующими виртуальными энергетическими объектами – крупными частицами жидкости.

Заметим, что тензоры напряжений и локальных скоростей могут быть вырожденными. Без возможности их обращения смена базисов выполняется только в опера-

циях произведения с тензорами формы $\overset{\wedge}{\mathbf{v}} \cdot \overset{\vee}{\mathbf{r}} = \overset{<}{\mathbf{v}}$ [с⁻¹], либо путем алгоритмического синтеза по интерполяционным оценкам состояния окружающей жидкости.

По аналогии [9], внутри подвижных частиц жидкости вовлекается скалярная функция распределения температур, растекающихся между свободными частицами по отрицательным градиентам; или связанное скоростью звука изменение плотности упругого газа в функции от дивергенции скорости и величины давления, в том числе с уточнениями по закону Бернулли и с учетом внутренней тепловой энергии, что в совокупности синтезирует расширенное решение прикладной задачи аэрогидромеханики.

В качестве основного цикла в вычислительном эксперименте принимается последовательность алгоритмов для согласования кинематических и реологических характеристик физического поля в явных численных схемах, сводимых к режиму последовательного установления нестационарных вычислительных процессов, протекающих по математическим моделям для вязких, упругих и сжимаемых жидкостей.

ТЕНЗОРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ОСНОВНЫХ ЗАКОНОВ ГИДРОМЕХАНИКИ

Формальное построение физических объектов и операций в тензорной математике [8] приводит к строгим определениям для своеобразной «модели мира» вычислительной гидромеханики:

1) континуально-корпускулярная вычислительная модель метода «Крупных частиц» [2] в тензорной записи сводится к двойной линейной разностной интерполяции физических полей (*вместо интегрирования уравнений движения второго порядка*);

2) движение и взаимодействие крупных частиц жидкости строится в операциях произведения, что более соответствует физике пространственных процессов (*нет ограничений по малости дифференциальных аппроксимаций*);

3) использование явных численных схем и дискретных числовых полей служат повышению эффективности прямых вычислительных экспериментов, и не исключают возможности контроля корректности, и, по необходимости, задействования гибридных схем для достижения адекватных инженерных результатов прямого численного моделирования.

Закон движения для свободной частицы сплошной среды (**Ошибка! Источник ссылки не найден.**):

$$\overset{\rightarrow}{\mathbf{f}} = \overset{\rightarrow}{\mathbf{w}} \cdot \overset{\rightarrow}{\mathbf{m}} = \overset{\rightarrow}{\mathbf{w}} \cdot \overset{\vee}{\boldsymbol{\rho}} \cdot \overset{\wedge}{\mathbf{r}} ; \quad [\text{Н, кг} \cdot \text{м}/\text{с}^2] \quad (5)$$

Тензор вязких напряжений в потоке локальных скоростей (**Ошибка! Источник ссылки не найден.**):

$$\overset{<}{\mathbf{f}}_H = \overset{\wedge}{\mathbf{v}}_H \cdot \overset{\vee}{\boldsymbol{\eta}} / \lambda = \overset{<}{\mathbf{v}}_H \cdot \overset{<}{\boldsymbol{\eta}} / \lambda , \quad [\text{Н}/\text{м}] \quad (6)$$

Тензор упругих напряжений при деформации корпускулы¹²:

$$\overset{<}{\mathbf{f}}_T = \overset{\wedge}{\mathbf{v}}_T \cdot \overset{\vee}{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \overset{<}{\mathbf{t}} / \lambda = \overset{<}{\mathbf{v}}_T \cdot \overset{<}{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \overset{<}{\mathbf{t}} / \lambda , \quad [\text{Н}/\text{м}] \quad (7)$$

¹² Реологические параметры жидкости в тензорной математике не сохраняют форму традиционных выражений, и для согласования физических размерностей введена характерная скалярная дистанция λ [м] в записях законов вязкости и упругости.

где тензор локальных скоростей $\hat{\mathbf{v}} = {}^+ \hat{V} i - {}^o \hat{V} i$ [м³/с] (Рис. 2); реологические тензоры: $\hat{\mathbf{m}} = \hat{\rho} \cdot \hat{\mathbf{r}}$ [кг] тензор массы–инерции; $\hat{\mathbf{r}}$ [м³] тензор формы; $\hat{\rho}$ [кг/м³] «условная плотность» сохранения предыстории девиаций – внутренних «живых сил» подвижных корпускул; $\hat{\eta}$ [кг/с/м²] тензоры динамической вязкости и жесткости $\hat{\mathbf{k}}$ [кг/м²] реальной жидкости, λ [м] дистанция ближнего взаимодействия смежных частиц.

Вычислительная модель содержит реологические свойства жидкости: вязкость и упругость, при этом соотношение интенсивностей получающихся напряжений определяет возникновение критических режимов течения с образованием струй, вихревых слоев и кавитационных разрывов. Под действием тензора внутренних напряжений, частица жидкости получает приращение скорости внутреннего (замкнутого) движения, традиционно представляемого с помощью трех динамических состояний:

$$\hat{\mathbf{f}} = \hat{\mathbf{v}}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot t + \hat{\mathbf{v}}_H \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}} / \lambda + \hat{\mathbf{v}}_\Gamma \cdot \hat{\mathbf{k}} \cdot t / \lambda = \hat{\mathbf{f}}_0 + \hat{\mathbf{f}}_H + \hat{\mathbf{f}}_\Gamma, \text{ [Н/м]} \quad (8)$$

где тензоры $\hat{\mathbf{f}}_0$ – давление, $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ – коэффициент сжатия. Получающийся характеристический полином может использоваться в оценках состояния жидкости, где реологические параметры проявляются в виде главных инвариантов тензора конвективных скоростей:

$\hat{\mathbf{v}}_0$: $\mathbf{I} \neq 0$ – сжимаемость \rightarrow кавитационный разрыв плотности;

$\hat{\mathbf{v}}_H$: $\mathbf{II} \neq 0$ – поворот \rightarrow образование свободной струи или турбулентного вихря;

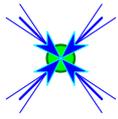
$\hat{\mathbf{v}}_\Gamma$: $\mathbf{III} \neq 0$ – деформация чистая, если другие инварианты тензоров равны нулю.

Так, 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, что предопределяет зарождение свободного турбулентного вихря внутри крупной частицы жидкости. Такой гибридный алгоритм можно использовать за пределами аппроксимационного разрешения на относительно грубых сетках, либо для уточнения решения, когда сеточная область в зоне вихреобразования должна сгущаться.

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ТЕНЗОРНОГО ОБОБЩЕНИЯ ПРИКЛАДНОЙ ЗАДАЧИ ГИДРОМЕХАНИКИ

На этапах вычислительного эксперимента поле скорости $\hat{\boldsymbol{\omega}}$ [м³/с] формализуется с использованием потенциально вырожденных тензоров, что вполне удовлетворяет традиционному аддитивному построению модели течения $\hat{\mathbf{r}} = {}^o \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{v}} \cdot t$ [м³] в абсолютном времени t [с]. С целью сопоставления логики вычислительных операций с традиционными понятиями механики сплошных сред, допустим справедливость определений для тензора – аффинора в глобальной системе координат, и разложение Коши-Гельмгольца [3] для пространственных смещений: расширение (*дивергенция*); закрутка (*ротор*) и деформация (*сдвиг*).

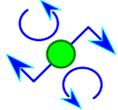
Выделением диагонального тензора $\hat{\mathbf{v}}_o$ [м³/с], такого, что след девиаторного остатка $\text{tr} \hat{\mathbf{v}}^*$ будет равен нулю [7], получим тензор шарового сжатия



$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{v}} &= \hat{\mathbf{v}}_0 + \hat{\mathbf{v}}_{\wedge}^* \quad (\text{tr } \hat{\mathbf{v}}^* = 0) & [\text{м}^3/\text{с}]; \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} &= \hat{\mathbf{v}}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{t} & [\text{кг}/\text{с}^2], \end{aligned} \quad (9)$$

где детерминант тензора $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ [кг/с² = Н/м] определяет давление, $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ [Н/м²] – коэффициент объемного сжатия – модуль продольной упругости.

Кососимметричная суперпозиция с компонентами девиаторного тензора $\hat{\mathbf{v}}^*$ выделяет начальный импульс к вращению частиц жидкости, с возникновением напряжения $\hat{\mathbf{f}}_H$ в Ньютоновском определении механики вязкой жидкости (6):



$$\hat{\mathbf{f}}_H = \hat{\mathbf{v}}_H \cdot \hat{\boldsymbol{\eta}} / \lambda = (\hat{\mathbf{v}}^* - \hat{\mathbf{v}}^{*T}) \cdot \hat{\boldsymbol{\eta}} / (2\lambda). \quad [\text{кг}/\text{с}^2] \quad (10)$$

с матрицей коэффициентов вязкости $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ [Н·с/м³] в произведении с тензором скоростей локальных деформаций $\hat{\mathbf{v}}_H$ [м³/с].

Симметризация девиаторного тензора $\hat{\mathbf{v}}^*$ [м³/с] связывается со сдвиговыми напряжениями $\hat{\mathbf{f}}_G$ [Н/м²], возникающими внутри крупной частицы сплошной среды по закону Гука (7):



$$\hat{\mathbf{f}}_G = \hat{\mathbf{v}}_G \cdot \hat{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \mathbf{t} / \lambda = (\hat{\mathbf{v}}^* + \hat{\mathbf{v}}^{*T}) \cdot \hat{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \mathbf{t} / (2\lambda), \quad [\text{кг}/\text{с}^2] \quad (11)$$

с модулем упругости $\hat{\boldsymbol{\kappa}}$ [Н/м³] и симметричным тензором относительных локальных смещений в окрестности крупной частицы жидкости $\hat{\mathbf{v}}_G \cdot \mathbf{t}$.

Реологические характеристики состояния жидкости $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ [Н/м²], $\hat{\boldsymbol{\kappa}}$ [Н/м³] и $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ [Н·с/м³] – могут также задаваться скалярными коэффициентами, аналогами шаровых тензоров в традиционных канонических зависимостях между напряжениями, локальными деформациями и вязкостными движениями сплошной среды. В тензорном обобщении неявно представляется анизотропия практического связывания перекрестных компонент для взаимовлияния внутренних напряжений в реологических характеристиках жидкости, представляемых традиционных в скалярных описаниях с помощью безразмерных коэффициентов Пуассона μ .

Полный тензор внутренних напряжений однозначно связывает геометрические смещения, скорости деформаций и приращения скоростей с поверхностными напряжениями:

$$\hat{\boldsymbol{\varphi}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \hat{\mathbf{f}}_G + \hat{\mathbf{f}}_H = (\hat{\mathbf{v}}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \hat{\mathbf{v}}_G \cdot \hat{\boldsymbol{\kappa}} / \lambda) \cdot \mathbf{t} + \hat{\mathbf{v}}_H \cdot \hat{\boldsymbol{\eta}} / \lambda \quad [\text{Н}/\text{м}^2]. \quad (12)$$

Для приведения закона движения с инерционной массой $\hat{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{t} = \hat{\mathbf{m}} \cdot \hat{\mathbf{v}}$ [кг/с] к новым зависимостям для поверхностных напряжений $\hat{\boldsymbol{\varphi}}$ [кг/м·с²], необходим сомножитель с размерностью пространственного вектора $\hat{\lambda}$ [м], который по физическому

смыслу соответствует либо вектору направления движения для теоремы Жуковского о свободном вихредиполе, либо расстоянию между взаимодействующими частицами жидкости.

О ПОСТРОЕНИИ ТЕНЗОРНЫХ ЧИСЛОВЫХ ОБЪЕКТОВ И МОДЕЛИРУЮЩИХ АЛГОРИТМОВ

Геометрическое построение нерегуляризованных сеточных пространств [12] в явных численных схемах первого порядка для последовательного интегрирования в сопряженных этапах континуально-корпускулярного вычислительного эксперимента при моделировании нестационарных процессов в гидромеханике представляется последовательным отображением архитектуры цифрового вычислительного комплекса:

1. Континуально-корпускулярное разделение этапов вычислительного эксперимента в гидромеханике строится в неразрывном пространстве физических величин, изначально определяемых в единой абсолютной системе координат с использованием скалярных, векторных и тензорных характеристик состояния и законов трансформации подвижной и деформируемой сплошной среды;

2. В операциях произведения с участием внешних (массовых) и внутренних (поверхностных) напряжений за расчетный интервал времени перестраивается внутреннее состояние каждой расчетной ячейки по образу независимой крупной частицы жидкости, аккумулирующей внутреннюю энергию и влияющей на кинематические реакции в интерполяционном перестроении обновляемых физических полей в исходных расчетных узлах;

3. При весьма сложных физических законах гидромеханики включается дополнительный третий этап вычислений для контроля и корректировки внутреннего состояния частиц жидкости, с согласованием законов сохранения массы и количества движения свободных частиц жидкости с позиций центровки вычислений на двух главных этапах вычислительного эксперимента по скалярному аргументу – времени.

Вычислительное пространство строится на неподвижных нерегуляризованных узлах: **Point**, в индексированном множестве сеточных ячеек для трехмерной интерполяции с опорой на Евклидовы базисы: **Base**, внутри и в окрестности которых строится математика согласования физических законов с использованием свободных векторов: **Vector**.

Объектно-ориентированное программирование на алгоритмических языках C++ или D позволяет перенести на этап компиляции исходных текстов программ основной контроль корректности математических операций, если они применяются к однозначно определенным по физическим характеристикам числовым объектам, в том числе содержащим предварительно рассчитанные обратные матрицы, детерминанты или собственные значения и векторы, используемые в формировании конкретных математических моделей.

Основные вычислительные объекты [13] определяются из условия быстрого и независимого исполнения вычислительных операций и, по необходимости, с возможностью быстрой перестройки вычислений для применения гибридных алгоритмов в зависимости от текущих условий существования физического явления в локальной подобласти:

```
typedef double Real; // скалярная величина в глобальном пространстве и времени
typedef double real; // локальные или разностные отсчеты в пространстве и времени
struct Tensor; // тензорный объект без контекстных связей для быстрого счета
struct Base; // координаты местоположения и связный базис Евклидовой СК
struct Cell; // числовая ячейка со смежными контекстными связями
```

```

struct Point;           // точка дальних мировых отсчетов в масштабе абсолютной СК
struct Vector;        // свободный разностный вектор в локальном масштабе
struct Space;         // пространство узловых элементов сеточной области в целом
struct Volume;       // множество свободных – подвижных и деформируемых ячеек
    
```

Так, в случае автоматического преобразования сложных величин **Vector** или **Tensor** к локальной величине **real** будут получаться длина вектора и детерминант матрицы тензора, всякие другие преобразования компилятор будет помечать ошибочными. Разность величин типа **Point** может дать только величину **Vector**, в то время как сложение объектов типа **Vector** с величинами **Vector** или **Point** приведет тому же типу данных, и никакому другому.

Современные компьютеры обладают практически неограниченными объемами оперативной памяти и существенно малой скоростью арифметико-логических операций при использовании больших вычислительных массивов. Для технического обеспечения сквозного распараллеливания операций основные массивы данных **Space** и **Volume** должны сохраняться для текущего, предыдущего и последующего срезов во времени, что позволит синхронизировать параллельные вычисления в случае не полного разделения этапов эксперимента по независимым физическим процессам, или при необходимости создания какие либо циклов для активного или релаксационного согласования параметров вычислительной среды в сложных и плохо обусловленных математических моделях.

В трехмерной тензорной математике со всеми вычислительными объектами должны связываться логические предикаты (*token-признаки*) для установки типа числовых структур, и их принадлежности к абсолютному или локальному базису, и которые повсеместно используются для автоматических преобразований в соответствии с исходными установками в уравнениях аэрогидромеханики. Как минимум, можно сформировать базовые значения s-предикатов, которые будут включаться во все числовые объекты в виде особой тройки двоичных бит:

“000” – T – скалярная величина в абсолютном базисе или инвариант тензора;
 “001” – \vec{A} – вектор в глобальной системе координат (СК);
 “010” – \overleftarrow{a} – вектор в локальном базисе крупной частицы;
 “011” – t – размерная скалярная величина в локальной системе отсчета;
 “100” – \hat{r} – тензор формы крупной частицы жидкости в глобальной СК;
 “101” – \vec{v} – смешанный базис проекций векторов на локальную СК;
 “110” – \overleftarrow{m} – базис локальных векторов в проекциях глобальной СК;
 “111” – $\overline{\rho}$ – определение тензорной величины в локальном базисе.

Непрерывный контроль битовых масок-признаков особенно важен в случае глубокого распараллеливания вычислительных операций на сложных гибридных системах, разделяющих моделирование на большие пространственные блоки, между которыми должна осуществляться автоматическая конвертация числовых структур для согласования решений на смежных границах или в областях с перехлестом нерегулярных сеточных аппроксимаций, и где возможны непредсказуемые перестроения структуры физических полей аэрогидромеханики.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из необходимости адаптивного управления вычислительным экспериментом со сквозным контролем текущего состояния всех числовых объектов и операций, устанавливаются функциональные или контекстные требования к специализированной среде программирования для проектирования, построения и реализации прямых вычислительных экспериментов в континуально-корпускулярных физических средах:

1) элементарные пространственно-временные объекты и базовые физические явления записываются тензорными величинами в размерном виде, что допускает визуальный контроль и применение гибридных схем с инженерными эмпириками и математическими асимптотиками;

2) вычислительные операции инвариантно определяются в проекциях глобальной системы координат, и ассоциируются обратными аппроксимациям в локальных базисах, геометрически связанных произведениями числовых объектов – крупных частиц – конечных объемов жидкости.

Объектно-ориентированная среда прикладного программирования связывает числовые объекты арифметико-логическими операциями:

1) логические или эмпирические алгоритмы формализуют законы прикладной гидромеханики, способы формирования и методы анализа текущего состояния сплошной среды в условиях интенсивной трансформации числовых объектов;

2) сложение применяется к числовым объектам в едином геометрическом базисе при строгом соответствии физических размерностей, в рамках predetermined законов гидромеханики (пп. 1);

3) произведение исполняется с векторами и тензорами в дуальных координатных базисах, что исключает повышение ранга в одночленных произведениях, если это не покрывается синтезом алгоритмов (пп. 1) или анализом числовых объектов (пп. 2).

Алгоритмические последовательности управляют числовыми объектами, формализующими реологические свойства и законы движения в континуально-корпускулярном представлении механики сплошных сред:

1) скалярные или инвариантные величины, например время t , участвуют в операциях произведения или представляются производными от любых числовых объектов;

2) векторные величины участвуют в операциях сложения только с соразмерными векторами, или в операциях произведения с тензорами для изменения координатных базисов;

3) тензорные величины синтезируют числовые объекты или характеризуют состояние крупных частиц жидкости, представляя геометрические деформации в качестве физических явлений и процессов гидромеханики в функции скалярного времени.

С использованием тензорных объектов формулируются основные законы гидромеханики, а их виртуальное конструирование и текущий анализ состояния образуют этапы прямого численного моделирования.

REFERENCES

1. *G. Astarita and G. Marrucci. Principles of non-Newtonian fluid mechanics.* – McGRAW-HILL Book Company (UK), 1974. – 289 p.
2. *Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М. Метод крупных частиц в газовой динамике. Вычислительный эксперимент.* – М.: Наука, 1982. 370 с.

3. Готман А. Ш. **Тензорное исчисление**. – Новосибирск: Новосибирская государственная академия водного транспорта, 2007. – 129 с.
4. Дегтярев А. Б., Храмушин В. Н. **Проектирование и построение вычислительных экспериментов в гидромеханике с использованием явных численных схем и алгоритмов тензорной математики** / Математическое моделирование. М.: – 2014, том 26, № 11, стр. 4–17.
5. Дородницын А. А. **Избранные научные труды**. Т.1,2 – М.: ВЦ РАН, 1997. Т. 1. – 395 с.; Т. 2. – 351 с.
6. Мак-Коннел А. Дж. **Введение в тензорный анализ**, 1963. – М.: Наука. – 411 с.
7. Филин А.Н. **Прикладная механика твердого деформируемого тела**. Т.1. - М.: Наука, 1975, 832 с.
8. Храмушин В. Н. **Трехмерная тензорная математика вычислительных экспериментов в гидромеханике**. Владивосток: ДВО РАН, 2005. 212 с.
9. Эглит М. Э. **Лекции по основам механики сплошных сред**. – М.: Издательство Московского университета, 2008. – 318 с.
10. Bryce S. DeWitt, **Dynamical theory of groups and fields**. Gordon and Breach, N.-Y., 1965. 248 p.
11. A. Garrett Lisi, **An Exceptionally Simple Theory of Everything**. arXiv:0711.0770v1 [hep-th] 6 Nov 2007
12. Wesseling P. **Principles of Computational Fluid Dynamics**. Springer Series in Computational Mathematics, 2001. 644 p.
13. Программа построения числовых объектов и функций трехмерной тензорной математики для вычислительных экспериментов в гидромеханике (Tensor) СПбГУ, Роспатент № 2013619727

THREE-DIMENSIONAL TENSOR MATHEMATICS OF COMPUTATIONAL EXPERIMENT IN FLUIDMECHANICS.

A. Bogdanov, A. Degtyarev, V. Khramushin

Department of Computer Modelling and Multiprocessor Systems,
Faculty of Applied Mathematics and Control Processes of Saint-Petersburg State University

Architecture of a digital computing system determines the technical foundation of a unified mathematical language for exact arithmetic–logical description of phenomena and laws of continuum mechanics for applications in fluid mechanics and physical field theory. Enhancement of modern computers involves computing operations in optimally formalized set of locally connected digital geometric objects, existing and transforming independently, and being surrounded by similar virtual entities. Deep parallelization of computing processes serves to the revival of application of functional programming at a new technological level, providing traceability of computing processes with automatic application of multiscale hybrid circuits and adaptive mathematical models for the true reproduction of the fundamental laws of physics and continuum mechanics. Tensor formalization of numerical objects and computing operations serves to spatial interpolation of rheological state parameters and laws of the fluid mechanics as mathematical models in the local coordinates of the elementary numeric cells – large liquid particles.

Keywords: computational experiment, tensor mathematics, fluid mechanics.

Bogdanov Alexander Vladimirovich – doctor of physical and mathematical sciences, professor, bogdanov@csa.ru

Degtyarev Alexander Borisovich – doctor of technical sciences, professor, deg@csa.ru

Khramushin Vasily Nikolaevich – PhD, doctoral student, khram@mail.ru