УДК 004.9:504:519.6

И.А. БРОВЧЕНКО

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЧАСТИЦ В ЗАДАЧАХ С НЕСТРУКТУРИРОВАННЫМИ СЕТКАМИ

Abstract. *In present paper an effective and time-conserving method of calculating the interaction forces between particles that significantly reduce the time of calculations and memory usage is proposed. On the basis of the method a new method for fast searching of particles in the cells of unstructured grids was developed. The developed algorithm can be applied to any Lagrangian model such as "particle-particle" and "particle-mesh" and their variations.*
Key words: *particle methods, unstructured grids.*

Анотація. *В роботі запропонований ефективний економічний метод розрахунку сил взаємодії між частками, що дозволяє значно скорочувати час розрахунків, а також економити оперативну пам'ять. На основі розглянутого методу був розроблений новий метод швидкого пошуку часток у комірках неструктурованих сіток. Розроблений алгоритм може бути застосований у будь-яких лагранжевих моделях типу „частка-частка", „частка-сітка" та їх варіаціях.*
Ключові слова: *методи часток, неструктуровані розрахункові сітки.*

Аннотация. *В работе предложен эффективный экономичный метод расчета сил взаимодействия между частицами, позволяющий значительно сокращать время расчетов, а также экономить оперативную память. На основе рассмотренного метода был разработан новый метод быстрого поиска частиц в ячейках неструктурированных сеток. Разработанный алгоритм может быть применен в любых лагранжевых моделях типа «частица-частица», «частица-сетка» и их вариациях.*
Ключевые слова: *методы частиц, неструктурированные расчетные сетки.*

1. Введение

Моделирование методами частиц становится все более популярным с развитием вычислительных возможностей и параллельных технологий [1, 2]. Важным моментом как в теоретических, так и экспериментальных исследованиях является умение прослеживать движение большого числа частиц в полях, создаваемых ими самими и под действием внешних сил. В настоящее время все более привлекательными становятся гибридные модели (частицы плюс сеточные модели), особенно в гидродинамических задачах, в которых необходимо рассматривать разномасштабные процессы. Термин «модели частиц» является общим для класса вычислительных моделей, в которых дискретное описание физических явлений включает использование взаимодействующих частиц. В большинстве приложений этим частицам можно прямо сопоставить физические объекты. Каждая частица может иметь набор атрибутов, таких как масса, заряд, положение, скорость. Состояние физической системы определяется атрибутами конечного ансамбля частиц, а эволюция системы определяется законами взаимодействия этих частиц. Особенность, которая делает модели частиц привлекательными с вычислительной точки зрения, состоит в том, что ряд атрибутов частицы сохраняется, и поэтому их не надо изменять, когда вычислительная модель развивается во времени. Связь между частицами вычислительной модели и частицами физической системы в значительной степени определяется соотношениями ограниченных вычислительных ресурсов и характерных пространственных и временных масштабов физических систем. Данная работа посвящена развитию эффективных и экономичных методов сортировки и поиска частиц в гибридных моделях, где рассматриваются частицы и конечноразностные сетки. Такие задачи возникают при необходимости рассмотреть движение частиц в заданном гидродинамическом поле, характеристики которого (поле скоростей, давление, возвышения свободной поверхности) заданы в узлах конечноразностной сетки. В моделировании методом частиц можно выделить две основные задачи: вычисление сил взаимодействия между частицами и интегрирование траекторий частиц.

2. Расчет сил взаимодействия между частицами в модели «частица-частица»

Рассмотрим модель «частица-частица», где необходимо рассчитывать силы взаимодействия между частицами. Во всех задачах, где возникают подобные силы (гравитационные, кулоновские, давление в жидкостях), для расчета сил взаимодействия на каждом временном шаге модели необходим расчет расстояний между частицами. В вычислительной гидродинамике широко используется метод SPH [3, 4] (гидродинамика сглаженных частиц), в котором сплошная среда моделируется методом взаимодействующих частиц. При общем количестве частиц N для рассчета расстояний между всеми частицами потребуется N^2 операций. В большинстве приложений силы взаимодействия являются короткодействующими и их можно не учитывать, начиная с некоторого расстояния, которое будем называть эффективным радиусом взаимодействия R_f. Но для того чтобы выяснить, нужно ли учитывать какую-либо частицу, надо сначала определить расстояние до неё, что, в свою очередь, дает количество операций порядка N^2. Возникает задача о сортировке частиц по координатам таким образом, чтобы вычислять расстояния только для некоторого подмножества N_n общего количества частиц N. Для этого для двумерной задачи, следуя [1], вводится цепочечная сетка – решетка размерностью $M_x \times M_y$, покрывающая расчетную область с размером ячейки, равным R_f. Тогда в силу, действующую на частицу, находящуюся в ячейке, будут оказывать ненулевой вклад только те частицы, которые находятся либо в этой же ячейке, либо в девяти соседних. Для определения, какие именно частицы находятся в соседних ячейках, нужно провести предварительную сортировку частиц. Предварительная адресная сортировка проводится согласно алгоритму, описанному в [1], следующим образом. Вначале нужно ввести два вспомогательных сортировочных массива: массив заголовков H размерностью $M_x \times M_y$ и цепочечный массив LL размерностью N. Перед началом сортировки эти массивы следует обнулить и для каждой частицы i выполнить действия:

1. Определить ячейку цепочечной сетки q, в которой находится частица.
2. Добавить частицу i в заголовок списка для ячейки q:

$$LL(i) = H(q), \quad H(q) = i .$$

После проведенной сортировки номер первой частицы, находящейся в ячейке q, можно определить как $i = H(q)$, а все последующие частицы можно перебрать, используя соотношение $i = LL(i)$ до тех пор, пока полученный номер частицы не станет равным нулю. Таким образом можно определить все частицы, находящиеся в ячейке q. После передвижения частиц (на следующем временном шаге) необходимо опять обнулить сортировочные массивы и повторить процедуру сортировки. Если предположить, что частицы равномерно располагаются по всей расчетной области, то полное число проверок приблизительно равно $9N^2 / M_x M_y$, что даёт значительное уменьшение числа операций при малых отношениях радиуса взаимодействия к линейным размерам расчетной области.

3. Быстрый поиск частиц в модели «частица-сетка»

Рассмотрим теперь задачу, в которой силы, действующие на частицы, заданы в узлах неподвижной сетки, так называемая модель «частица-сетка». В этом случае необходима интерполяция данных из узлов сетки в точки расположения частицы. Для того чтобы применить любой из методов интерполяции, сначала необходимо определить ближайшие к частице узлы сетки или ячейку сетки, в которой находится частица. В случае прямоугольных равномерных сеток расположение частицы находится в две операции:

$$i = [(x - x_o)/dx] + 1,$$

$$j = [(y - y_0)/dy] + 1.$$

Здесь (i, j) – номер ячейки прямоугольной сетки, (x, y) – координаты частицы, (x_0, y_0) – координаты левого нижнего угла прямоугольной сетки, (dx, dy) – разрешение сетки. Здесь и далее операция $[\ \ ]$ означает взятие целой части.

В случае неравномерных, криволинейных или неструктурированных сеток задача поиска ячейки становится более сложной и проблема выбора оптимального алгоритма поиска – более важной, так как искомый алгоритм должен применяться на каждом временном шаге модели. Рассмотрим общий случай сетки, состоящей из треугольных элементов. Так как любую сетку из элементов сложной формы можно преобразовать в сетку из треугольных элементов, то изложенный ниже алгоритм пригоден для любых случаев. Введем обозначения: i_e – номер треугольного элемента, i_1, i_2, i_3 – номера узлов, составляющих этот элемент, (x_i, y_i), $i = \overline{1,3}$ – координаты этих узлов. Предполагаем, что узлы каждого треугольного элемента расположены по порядку против часовой стрелки. Тогда критерием попадания частицы в данный элемент можно считать положительный знак векторного произведения:

$$(x_i - x, y_i - y) \times (x_{i+1} - x, y_{i+1} - y) > 0, \quad \forall i = \overline{1,3}. \tag{1}$$

Для того чтобы ускорить нахождение требуемого элемента, введем новую равномерную прямоугольную сетку с размером ячейки, равным максимальному размеру всех элементов сетки из треугольных элементов. Обозначим разрешение вспомогательной прямоугольной сетки (DXS, DYS) и предварительно рассортируем все треугольные элементы по ячейкам этой сетки. Для этого модифицируем алгоритм цепочечной сортировки, описанный в предыдущем разделе. Изменение алгоритма необходимо, так как каждый треугольный элемент может находиться более чем в одной ячейке цепочечной сетки. Максимально каждый треугольник может находиться одновременно в четырех ячейках цепочечной сетки. Определим для каждого треугольника максимальные и минимальные координаты:

$$x_{e\min} = \min(x_i),\ y_{e\min} = \min(y_i),\ i = \overline{1,3},$$

$$x_{e\max} = \max(x_i),\ y_{ema[} = \max(y_i),\ i = \overline{1,3}.$$

Для сортировки треугольных элементов введем массив заголовков $H(DXS*DYS,4)$ и цепочечный массив $LL(N_e,4)$. Для каждого из N_e треугольников проведем следующие операции:

1. Определим номера ячеек q_j, $j=\overline{1,4}$, в которые могут попасть части треугольного элемента i_e:

$$q_1=\left(\left[x_{e\min}/DXS\right]+1,\left[y_{e\min}/DYS\right]+1\right),\quad q_2=\left(\left[x_{e\max}/DXS\right]+1,\left[y_{e\min}/DYS\right]+1\right),$$
$$q_3=\left(\left[x_{e\max}/DXS\right]+1,\left[y_{e\max}/DYS\right]+1\right),\quad q_4=\left(\left[x_{e\min}/DXS\right]+1,\left[y_{e\max}/DYS\right]+1\right).$$

2. Для каждой ячейки q_j:

$$LL\left(i_e,j\right)=H\left(q_j,j\right),$$

$$H\left(q_j,j\right)=i_e.$$

Следует отметить, что описанная выше процедура предварительной сортировки проводится один раз перед основным временным циклом и больше не повторяется. Алгоритм поиска треугольного элемента, в котором находится частица на каждом временном шаге, будет выглядеть так:

1. Проверить элемент, в котором находилась частица на предыдущем временном шаге по критерию (1).

2. Определить ячейку цепочечной сетки, в которой находится частица:

$$q=\left(\left[x/DXS\right]+1,\left[y/DYS\right]+1\right).$$

3. Перебрать все треугольные элементы, которые полностью или частично находятся в ячейке q. Для этого проделать следующие действия в цикле $j=\overline{1,4}$:

– определить номер первого треугольника $i_e=H\left(q,j\right)$;

– повторять, пока $i_e\neq 0$:

• в случае удовлетворения условия (1) для треугольника i_e выйти из всех циклов;

• $i_e=LL(i_e,j)$.

4. Запомнить номер треугольника i_e для использования при поиске на следующем временном шаге.

После нахождения номера треугольного элемента можно использовать любой из известных методов интерполирования, используя значение переменных в узлах составляющих элемента, а также значения в узлах окружающих элементов.

4. Выводы

В работе предложен эффективный экономичный метод расчета сил взаимодействия между частицами, позволяющий значительно сокращать время расчетов, а также экономить оперативную память. На основе рассмотренного метода был разработан новый метод быстрого поиска частиц в ячейках неструктурированных сеток. Разработанный алгоритм может быть применен в любых лагранжевых моделях типа «частица-частица» и «частица-сетка» и их вариациях. Главными особенностями алгоритма являются быстрая скорость его работы и экономия оперативной памяти, что достигается введением цепочечных массивов, которые не содержат большого количества нулевых элементов. Описанный алгоритм с успехом использовался в численных лагранжевых моделях распространения поверхностных пленок нефти [5, 6], взвеси [7, 8], а также в задачах по расчету трехмерных траекторий пассивных трассеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хокни Р. Численное моделирование методом частиц / Р. Хокни, Дж. Иствуд. – М.: Мир, 1987. – 638 с.
2. Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики. Ч. 2: Введение в методы частиц: Регулярная и хаотическая динамика / Зализняк В.Е. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2006. – 156 с.
3. Monaghan J.J. An introduction to SPH / J.J. Monaghan // Comput. Phys. Commun. – 1988. – Vol. 48. – P. 89 – 96.
4. Каліон В.А. Використання методу гідромеханіки згладжених часток для розв'язання задач гідродинаміки довкілля / В.А. Каліон, І.О. Бровченко, А.О. Кущан // Вісник Київського університету. – (Серія «Фізико-математичні науки»). – 2007. – № 4. – С. 77 – 83.
5. Бровченко И.А. Численный лагранжевый метод моделирования распространения поверхностных пятен нефти / И.А. Бровченко, В.С. Мадерич // Прикладная гидромеханика. – 2002. – Т. 4 (76), № 4. – С. 23 – 31.
6. Maderich V. Oil Dispersion by breaking waves and currents / V. Maderich, I. Brovchenko // Sea Technology. – 2005. – Vol. 46 (4). – P. 17 – 22.
7. Бровченко И.А. Двумерная лагранжевая модель переноса многофракционных наносов в прибрежной зоне моря / И.А. Бровченко, В.С. Мадерич // Прикладная гидромеханика. – 2006. – Т. 8 (81), № 2. – С. 9 – 17.
8. Бровченко И.А. Трехмерная лагранжевая модель переноса многофракционных наносов и ее применение к описанию гравитационных течений / И.А. Бровченко, В.С. Мадерич // Прикладная гидромеханика. – 2008. – Т. 11 (83), № 2. – С. 3 – 12.

Стаття надійшла до редакції 03.12.2009