

УДК 517.518

Г. Ю. Германюк, старший преподаватель;
Д. Е. Германюк, студент
Чайковский технологический институт
(филиал) Ижевского государственного технического университета

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ ОДНОМЕРНЫХ АНСАМБЛЕЙ ГИББСА

Рассмотрен программный комплекс для исследования одномерного ансамбля Гиббса в условиях попарного межчастичного взаимодействия. В основу программного комплекса положен канонический метод численного интегрирования динамических уравнений, повышающий достоверность получаемых результатов.

Ключевые слова: программный комплекс, одномерный ансамбль Гиббса, канонический метод численного интегрирования, функция Гамильтона, потенциал Леннарда-Джонса, моделирование

В работах [1–3] были рассмотрены компьютерные модели простейших систем, используемых для описания движения ансамблей частиц. Дальнейшее увеличение числа частиц в системе ($N \sim 10^2 - 10^6$), а также учет межчастичного взаимодействия привели к необходимости создания программного комплекса, использующего в своей основе канонический метод интегрирования. Основной особенностью канонического метода интегрирования [4–6] является тот факт, что сам процесс счета можно интерпретировать как малое консервативное возмущение исследуемой системы. Вследствие этого компьютерные модели на основе канонического метода позволяют исследовать систему в условиях малых консервативных возмущений, которые, как известно, играют основную роль в вопросах эволюции динамических систем [7]. Таким образом, использование указанного метода приводит к повышению адекватности результатов численного эксперимента.

В общем случае компьютерное моделирование устанавливает связь между исследуемым объектом и объектом, воспроизводимым на экране компьютером. Этапы моделирования представлены на рис. 1.

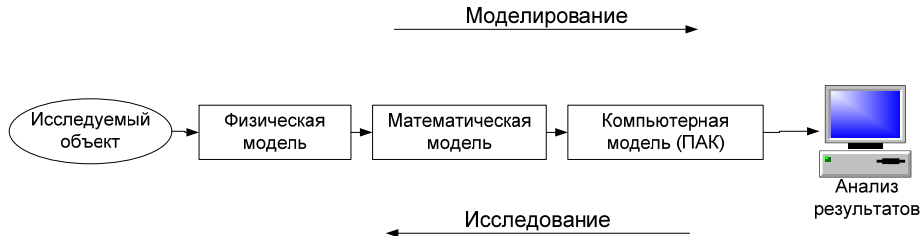


Рис. 1. Схема моделирования

В нашем случае физической моделью является одномерная совокупность частиц (система частиц) во внешнем потенциальном поле, в условиях попарного межчастичного взаимодействия и действия диссипативных сил, моделирующих процессы теплообмена [8].

Математической моделью указанной системы будет так называемый одномерный ансамбль Гиббса [9] (рис. 2). Рассмотрим его формализацию.

Пусть консервативная система состоит из N – частиц с массами m , связанных друг с другом потенциалом Леннарда-Джонса [10]:

$$U(x_{ij}) = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N U_0 \left[\left(\frac{x_0}{x_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{x_0}{x_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где x_0 – равновесное значение межчастичного взаимодействия; $x_{ij} = x_i - x_j$ – расстояние между i - и j -частицами; $U(x_0) = U_0$ – значение минимума потенциальной энергии.

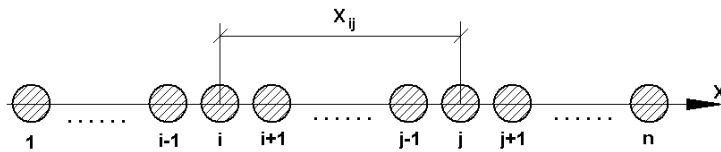


Рис. 2. Одномерный ансамбль Гиббса

Функция Гамильтона с учетом потенциала (1) и потенциала внешнего поля $U(x_i)$ запишется в виде

$$H = \sum_{i=1}^N H_i = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N U_0 \left[\left(\frac{x_0}{x_i - x_j} \right)^{12} - 2 \left(\frac{x_0}{x_i - x_j} \right)^6 \right] + U(x_i). \quad (2)$$

Используя обезразмеривающие соотношения

$$x \leftrightarrow x \cdot x_0, \quad H \leftrightarrow H \cdot U_0, \quad p \leftrightarrow p \cdot \sqrt{mU_0},$$

перейдем к безразмерной функции Гамильтона (2):

$$H = \sum_{i=1}^N H_i = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \left[\left(\frac{1}{x_i - x_j} \right)^{12} - 2 \left(\frac{1}{x_i - x_j} \right)^6 \right] + U(x_i).$$

Безразмерная система динамических уравнений, с учетом действия диссипативных сил, запишется в виде

$$\begin{cases} \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_{ij}} = -\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N 12 \left[\left(\frac{1}{x_{ij}} \right)^{13} - \left(\frac{1}{x_{ij}} \right)^7 \right] + \frac{\partial U(x_i)}{\partial x_i} + Q_{\text{дис}}(v), \\ \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = p_i, \end{cases} \quad (3)$$

где $i = 1, \dots, n$; $j = 1, \dots, n$; $i \neq j$; $U(x_i)$ – потенциал внешнего поля; $Q_{\text{дис}}(v)$ – диссипативная сила.

Канонический алгоритм интегрирования [6], реализующий численное интегрирование системы (3), имеет вид:

$$\begin{cases} p_i^{(k+1)} = p_i^{(k)} - \frac{\partial H(p_1^{(k)}, \dots, p_n^{(k)}; x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_i} \tau + Q_{\text{дис}}(v)\tau = \\ = p_i^{(k)} - \sum_{\substack{i,j=1, \\ i \neq j}}^N 12 \left[\left(\frac{1}{x_{ij}} \right)^{13} - \left(\frac{1}{x_{ij}} \right)^7 \right] \tau + \frac{\partial U(x_i)}{\partial x_i} \tau + Q_{\text{дис}}(v)\tau; \\ x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{\partial H(p_1^{(k+1)}, \dots, p_n^{(k+1)}; x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial p_i} \tau = x_i^{(k)} + p_i \tau, \end{cases} \quad (4)$$

где $i = 1, \dots, n$; τ – шаг интегрирования.

Алгоритм (4) был положен в основу блока интегрирования для программного комплекса, структурная схема которого представлена на рис. 3.



Рис. 3. Структура программного комплекса

Программный комплекс состоит из трех подсистем:

- подсистема моделирования;
- подсистема просмотра результатов;
- подсистема модификации.

Подсистема моделирования позволяет построить компьютерные модели и провести численный эксперимент на основе канонических алгоритмов интегрирования. Она состоит из следующих модулей:

- модуль описания модели – задает характеристики динамических систем и ее начальные параметры (схема интегрирования);
- модуль формирования эксперимента – на основе описанной модели создает программу для проведения численного эксперимента;
- модуль проведения эксперимента – проводит интегрирование модели на основе алгоритма интегрирования и передает полученный численный результат в подсистему модификации и в подсистему просмотра результатов.

Подсистема модификации позволяет вычислять среднюю потенциальную и среднюю кинетическую энергию и гамильтониан, используя данные, полученные в результате численного эксперимента. Так как процесс функционирования модификатора описан заранее, это обеспечивает его легкий вызов посредством одной кнопки, что экономит время оператора и системы. Результатом модификатора является новый набор данных, которые незамедлительно выводятся на экран (рис. 4).

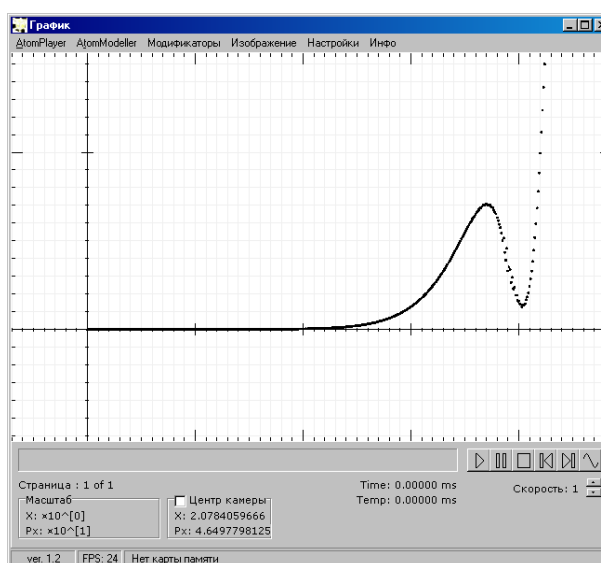


Рис. 4. Пример работы модификатора «Кинетическая энергия»

Модификатор состоит из следующих модулей:

- модуль расчета потенциальной энергии – производит вычисление средней потенциальной энергии системы по формуле

$$W_p = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(\left(\frac{1}{x_i - x_j} \right)^{12} - 2 \left(\frac{1}{x_i - x_j} \right)^6 \right)}{n};$$

- модуль расчета кинетической энергии – производит вычисление средней кинетической энергии системы по формуле

$$W_k = \frac{\sum_{i=1}^n p_i^2}{2n};$$

• модуль расчета гамильтониана – производит вычисление суммы кинетической и потенциальной энергий системы по формуле

$$H = W_k + W_p.$$

Подсистема просмотра результатов предоставляет инструменты для демонстрации числовых данных, полученных в результате проведения эксперимента. Состоит из следующих модулей:

- модуль загрузки данных – позволяет загрузить данные из файла на носителя в память программы;
- модуль вывода на экран – выводит различные зависимости в виде графиков или отображает фактические значения параметров;
- модуль сохранения изображения – позволяет сохранять графики в файл для дальнейшего использования.

Рассмотрим вопросы обеспечения программного комплекса.

В качестве средства разработки программного комплекса был выбран язык программирования Object Pascal в среде Delphi. В основе идеологии Delphi лежит технология визуального проектирования и методология объектно ориентированного событийного программирования [11, 12].

Delphi — это комбинация нескольких важнейших технологий:

- высокопроизводительный компилятор в машинный код;
- объектно ориентированная модель компонент;
- визуальное (а следовательно, и скоростное) построение приложений из программных прототипов;
- масштабируемые средства для построения баз данных.

Для реализации программного комплекса необходимы требования к ЭВМ:

- процессор – минимально Intel Pentium IV 1000 (рекомендуется Intel Core 2Duo и выше);
- оперативная память (RAM) – минимально 512 Мб;
- занимаемое место на диске – 10 Мб под программный комплекс и большой объем (от 5 Гб и выше) для результатов численного эксперимента.

Как и в натурном эксперименте, предусмотрены возможность разделения процесса проведения эксперимента и анализ его результатов. Поэтому основной комплекс вычислительных операций осуществляется в автоматическом режиме без участия оператора в удобное (например, ночное) время. После этого экспериментатор может просмотреть полученные результаты в скоростном режиме.

Рассмотрим основные особенности работы с программным комплексом.

При работе с программным комплексом экспериментатор в рабочем окне, используя шаблон, задает начальное состояние системы, вид потенциала и диссипативных сил. После этого в диалоговом окне открытия файла (рис. 5) отображается содержимое страницы заголовка этого файла: название, описание, количество страниц и ячеек, а также список параметров.

Там же выбираются страницы и ячейки, которые необходимо загрузить. Это позволяет наблюдать движение ансамбля, а также его частей в течение выбранного интервала времени.

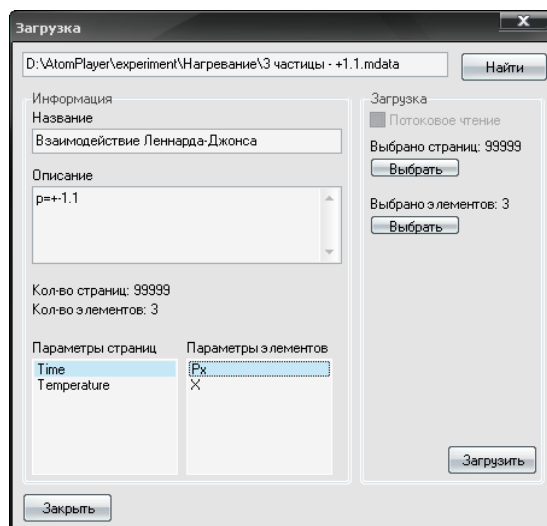


Рис. 5. Диалоговое окно открытия файла

На рис. 6 представлен фрагмент работы программного комплекса, воспроизводящий фазовую траекторию одной из частиц ансамбля под действием сил попарного межчастичного взаимодействия в условиях малых консервативных возмущений, моделируемых процессом счета.

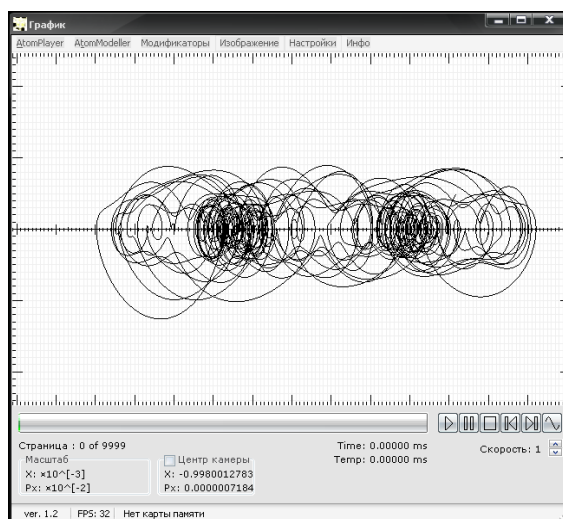


Рис. 6. Фазовая траектория частицы одномерного ансамбля

Представление экспериментальных данных производится путем вывода на экран с применением графического режима OpenGL [13].

Для сохранения текущего изображения на носитель информации необходимо нажать кнопку PrintScreen. При нажатии кнопки появится диалоговое окно, которое предложит выбрать место для сохранения и ввести название файла. Изображение

сохраняется в формате bmp (bitmap). Данный формат выбран ввиду того, что он сохраняет подробную информацию об изображении, не искажая ее сжатием, как это делает, к примеру, формат jpg. В дальнейшем, если необходимо, изображение можно сжать любой доступной программой по работе с изображениями.

Программный комплекс был использован для моделирования динамики ансамбля из $N = 1000$ частиц при низких температурах ($T \sim 1 - 2 K$). Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что использованный в блоке интегрирования канонический метод обеспечивает повышение адекватности и эффективности компьютерного эксперимента.

Возможно дальнейшее совершенствование программного комплекса, в частности, для моделирования пространственных молекулярных систем при распараллеливании процесса счета.

Список литературы

1. Ефимов И. Н., Морозов Е. А., Германюк Г. Ю. Влияние нелинейности на возникновение и развитие хаоса в одномерных системах // Вестн. Ижев. гос. техн. ун-та. – 2009. – № 3. – С. 162–166.
2. Использование канонического метода для моделирования молекулярных систем / И. Н. Ефимов, Е. А. Морозов, Г. Ю. Германюк и др. // Вестн. Ижев. гос. техн. ун-та. – 2009. – № 4. – С. 173–176.
3. Германюк Г. Ю., Германюк Д. Е. Об исследовании системы цепочки Тода каноническим методом // Сборник докладов второй Всероссийской конференции. Екатеринбург; Ижевск: Изд-во Ин-та экономики УрО РАН, 2007. – С. 97–100.
4. Ефимов И. Н., Морозов Е. А. Устойчивость канонического метода интегрирования гамильтоновых систем // Интеллектуал. системы в пр-ве. – 2003. – № 1. – С. 23–38.
5. Ефимов И. Н., Морозов Е. А. О принципе консервативных возмущений // Интеллектуал. системы в пр-ве. – 2005. – № 1. – С. 52–62.
6. Ефимов И. Н., Морозов Е. А. Каноническое интегрирование гамильтоновых систем. – Екатеринбург: Изд-во Ин-та экономики УрО РАН, 2006. – 143 с.
7. Табор М. Хаос и интегрируемость в нелинейной динамике. – М.: Эдиториал УРСС, 2001. – 320 с.
8. Теплотехника (курс общей теплотехники): учеб. для студентов вузов / под общ. ред. И. Н. Сушкина. – 2-е изд., перераб. – М.: Металлургия, 1973. – 480 с.
9. Гиббс Дж. В. Основные принципы статистической механики. – М.; Л.: Гостехиздат, 1946.
10. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. – М.: Мир, 1981. – 574 с.
11. Немнюгин С. А. Pascal и Turbo Pascal. Учебные языки программирования. – 2-е изд. – СПб.: Питер, 2008. – 544 с.
12. Культин Н. Б. Delphi 6. Программирование на OBJECT PASCAL. – 2-е изд. – М.: Вильямс, 2001. – 526 с.
13. OpenGL. Руководство по программированию / М. Ву, Т. Девис, Дж. Нейдер и др. – 4-е изд. – СПб.: Питер, 2006. – 624 с.

* * *

G. Y. Germanyuk, Senior Lecturer, Chaikovsky Technological Institute, branch of Izhevsk State Technical University

D. E. Germanyuk, Student, Chaikovsky Technological Institute, branch of Izhevsk State Technical University

Software Complex for Research of One-Dimensional Gibbs Ensembles Dynamics

The software complex for research of one-dimensional Gibbs ensembles dynamics under conditions of pairwise interparticle interaction is considered. The canonical method of numerical integration of dynamic equations is used as a base of the software complex to increase validity of results.

Keywords: software complex, one-dimensional Gibbs ensemble, canonical method of numerical integration, Hamilton function, Lennard-Jones potential, modeling

Получено 07.02.10

УДК 532.5.011

А. А. Калинин, кандидат технических наук, доцент;
В. А. Тененёв, доктор физико-математических наук, профессор;
Ю. В. Турыгин, доктор технических наук, профессор
Ижевский государственный технический университет

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ПИТАЮЩЕЙ ТРУБЕ МОЮЩИХ УСТРОЙСТВ

Дана постановка задачи о расчете течения жидкости в питающей трубе моечного устройства. Представлены результаты численного моделирования течения для трех видов моделей: трехмерной, осесимметричной и плоской.

Ключевые слова: гидродинамика моечных устройств, уравнения Навье – Стокса, математическая модель, криволинейные координаты, численный конечно-разностный метод

Практика использования устройств промывки высокого давления показывает, что промывающая способность жидкостных струй зависит от многих факторов, оказывающих влияние на состояние и трансформацию тела струи при ее распространении в воздушной среде. В первую очередь это структура струи, распределение скоростей частиц по сечению тела струи на подходе к промываемому полотну. Еще более сложной представляется задача теоретического описания соударения струи с пористой движущейся подложкой, ее (струи) проникновения (фильтрации) внутри объема многослойного полотна, захватывания и вымывания с поверхности и из толщ полотна загрязняющих частиц. Для промывки технологических полотен в бумагоделательном оборудовании используют струи диаметром обычно 1–3 мм, формируемых при прохождении через цилиндрические каналы сопел (насадков) протяженностью, соизмеримой с их диаметром. Струйные потоки создают нагнетанием жидкости под давлением от 20 до 100 МПа. При этом скорости истечения на выходе из сопел составляют от 50 до 180 м/с.

Истечение и распространение струи жидкости является сложным физическим процессом, зависящим от многих внешних и внутренних причин. Основной внешней причиной является воздействие на поверхность струи аэродинамических сил, величина которых зависит от относительной скорости струи и плотности окружающего газа. Аэродинамические силы стремятся деформировать и разорвать струю, а силы поверхностного натяжения препятствуют этому. Внутренними причинами, ведущими к распаду струи, являются различного рода начальные возмущения, вызываемые, например, нарушением цилиндрической формы струи при выходе из сопла, вибрациями сопла и др.

В общем случае моеющая способность струй зависит, в первую очередь, от скорости потока на выходе из сопла, от поперечного размера струи и структуры струи на дистанции промывки, от угла наклона струи к обрабатываемой поверхности и др. При промывке движущихся объектов большое значение имеет также скорость