

Аннотация

Работа посвящена параллельной программной реализации алгоритма прямого численного решения уравнения Больцмана, основанного на методе дискретных скоростей. Программная реализация допускает использование произвольного количества CPU и GPU гетерогенного вычислительного кластера. Использование большого количества GPU привело к существенному ускорению вычислений, что позволило проводить численное моделирование сложных многомерных течений разреженного газа. Проведён ряд расчётов стационарных и нестационарных двумерных задач. Проведено сравнение с методом ПСМ (прямого статистического моделирования).

Тема работы:

Моделирование двумерных течений разреженного газа на основе численного решения кинетического уравнения Больцмана.

Состав коллектива:

- Евгений Александрович Малков, д.ф.-м.н., СибГУТИ
- Сергей Олегович Полешкин, ИТПМ СО РАН

Гранты:

- РФФИ 16-57-48007 "Разработка высокопроизводительных компьютерных кодов и их применение для численного моделирования в аэродинамике и динамике разреженных газов руководитель - А.Н. Кудрявцев.
- РФФИ 18-11-00246 "Численное исследование возникновения и развития неустойчивостей в течениях разреженных газов руководитель - А.Н. Кудрявцев.

Научное содержание работы:

Постановка задачи

На основе прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана проведено моделирование ряда стационарных и нестационарных двумерных течений разреженного газа, обтекание плоской пластины конечной длины под нулевым углом атаки, распад разрыва в микроканале и неустойчивость Кельвина-Гельмгольца.

Введение

Изучение течений разреженного газа, когда длина свободного пробега сравнима или превосходит характерные размеры задачи, основано на микроскопическом описании, использующем одночастичную функцию распределения $f(t, \vec{r}, \vec{v})$, являющуюся плотностью в шестимерном фазовом пространстве в данный момент времени t , находящегося в данной точке физического пространства \vec{r} и имеющего соответствующие скорости \vec{v} . Действительно, в условиях, когда время релаксации сравнимо с динамическим временем задачи, зависящим от макропараметров газа - средней скорости, давления и температуры, статистическое равновесие не устанавливается, распределение скоростей нельзя считать максвелловским и поэтому требуется более детальное описание.

Математическая модель разреженного газа представляется нелинейным интегро-дифференциальным уравнением - кинетическим уравнением Больцмана [1]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = St(f, f), \quad (1)$$

В правой части уравнения (1) стоит квадратичный интегральный оператор следующего вида:

$$St(f, f) = \int_{R^3} d^3 v_1 \int_{S^2} d^2 n (f' f'_1 - f f_1) |\vec{V}| \sigma(|\vec{V}|, \cos(\theta)), \quad (2)$$

здесь

$$f = f(t, \vec{r}, \vec{v}), f_1 = f(t, \vec{r}, \vec{v}_1), \quad (3)$$

$$f' = f(t, \vec{r}, \vec{v}'), f'_1 = f(t, \vec{r}, \vec{v}'_1), \quad (4)$$

$$\vec{v}' = \frac{\vec{v} + \vec{v}_1}{2} + \frac{|\vec{V}|}{2} \vec{n}, \quad (5)$$

$$\vec{v}'_1 = \frac{\vec{v} + \vec{v}_1}{2} - \frac{|\vec{V}|}{2} \vec{n}, \quad (6)$$

$\vec{V} = \vec{v} - \vec{v}_1$, \vec{n} - единичный вектор (параметр столкновения), задающий направление относительной скорости после столкновения, $\sigma = \sigma(|\vec{V}|, \cos(\theta))$ - дифференциальное сечение рассеяния, (θ - угол между векторами относительной скорости частиц до и после столкновения). Уравнение Больцмана получено в предположении отсутствия кратных столкновений, пренебрежимо малая вероятность кратных столкновений согласуется с условием разреженности газа.

Структура интеграла столкновений обуславливает большие вычислительные затраты при расчете оператора столкновений. Поэтому до последнего времени решение практических задач динамики разреженного газа основывалось на, так называемых, модельных уравнениях [2]-[3] и на методах прямого статистического моделирования [5]-[6]. В модельных уравнениях оператор столкновений записывается в виде:

$$St(f) = \frac{F - f}{\tau}, \quad (7)$$

где F и τ - некоторые функции газодинамических параметров, τ имеет смысл времени релаксации. Ограничения, накладываемые на эти функции, обусловлены требованиями, предъявляемыми к оператору столкновений - сохранение массы, энергии и импульса. Также, оператор столкновений должен удовлетворять H -теореме Больцмана:

$$\int St(f) \log(St(f)) d^3 v \leq \int f \log(f) d^3 v. \quad (8)$$

Наиболее простым модельным уравнением является уравнение БГК [2], когда функция F в операторе столкновений (7) полагается максвеллианом с параметрами, соответствующими первым моментам функции распределения f :

$$F = \frac{\rho}{\sqrt[3]{2\pi T}} \exp\left(\frac{-(\vec{v} - \vec{V})^2}{2T}\right), \quad (9)$$

где

$$\rho = \int f d^3 v, \quad (10)$$

$$\vec{V} = \frac{1}{\rho} \int f \vec{v} d^3 v, \quad (11)$$

$$T = \frac{1}{3\rho} \int f (\vec{v} - \vec{V})^2 d^3 v. \quad (12)$$

В модели БГК время релаксации выражается через коэффициент вязкости μ : $\tau = \mu/(\rho T)$. Эта модель наглядно представляет процесс релаксации и качественно правильно его описывает, однако имеет ряд недостатков. В частности, она не допускает корректного перехода к гидродинамическому пределу. Явные недостатки модели БГК были в дальнейшем преодолены [7][3], но вопрос об области применимости аппроксимаций типа (7) остается открытым.

Наиболее распространенным методом численного моделирования течений разреженного газа является метод ПСМ (Прямого Статистического Моделирования) [5], особенно его экономичная реализация, использующая схему мажорантной частоты [6]. Этот метод активно развивается и обобщается на течения многокомпонентного газа, молекулярного газа, учитывая дополнительные степени свободы при распределении энергии и химическую кинетику [7]-[8]. Особенно рационально его использовать для решения задач высотной аэродинамики методом установления. Однако метод ПСМ является неэффективным при расчете нестационарных течений и/или течений при малых числах Маха.

Интегральный оператор столкновений

Для нелинейного кинетического уравнения Больцмана оператор столкновений в (1) имеет следующий вид:

$$St(f) = \int_{R^3} d^3 v_1 \int_{S^2} d^2 n (f' f'_1 - f f_1) |\vec{V}| \sigma(|\vec{V}|, \cos(\theta)), \quad (13)$$

здесь

$$f = f(t, \vec{r}, \vec{v}), f_1 = f(t, \vec{r}, \vec{v}_1), \quad (14)$$

$$f' = f(t, \vec{r}, \vec{v}'), f'_1 = f(t, \vec{r}, \vec{v}'_1), \quad (15)$$

$$\vec{v}' = \frac{\vec{v} + \vec{v}_1}{2} + \frac{|\vec{V}|}{2} \vec{n}, \quad (16)$$

$$\vec{v}'_1 = \frac{\vec{v} + \vec{v}_1}{2} - \frac{|\vec{V}|}{2} \vec{n}, \quad (17)$$

$\vec{V} = \vec{v} - \vec{v}_1$, \vec{n} - единичный вектор (параметр столкновения), задающий направление относительной скорости после столкновения, $\sigma = \sigma(|\vec{V}|, \cos(\theta))$ - дифференциальное сечение рассеяния, (θ - угол между векторами относительной скорости частиц до и после столкновения).

Структура интеграла столкновений обуславливает большие вычислительные затраты при расчете оператора столкновений. Проводить расчеты двумерных течений разреженного газа с высоким разрешением за приемлемое время возможно только на гибридных кластерах с узлами, содержащими наряду с центральными процессорами графические ускорители. Соответственно, целесообразно расширить модель программирования MPI включением технологии CUDA или иной технологии SIMD параллелизма, поддерживаемой графическими процессорами. Далее в статье описывается гибридная модель параллельного программирования, используемая при расчетах течений разреженного газа.

Запишем интеграл столкновений (13) в симметричном виде [1], удобном для построения консервативных схем его вычисления, сохраняющих массу, импульс и энергию:

$$I(\vec{v}) \equiv St(f)(\vec{v}) = \frac{1}{2} \int_{R^3 \times R^3} d^3 v_1 d^3 v_2 \int_{S^2} d^2 n f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) \times \\ \times [\delta(\vec{v} - \vec{v}'_1) + \delta(\vec{v} - \vec{v}'_2) - \delta(\vec{v} - \vec{v}_1) - \delta(\vec{v} - \vec{v}_2)] |\vec{V}| \sigma \quad (18)$$

Численный алгоритм

Запишем сеточную аппроксимацию функции распределения в виде

$$f(\vec{v}) = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \gamma_{\alpha} \delta(\vec{v} - \vec{v}_{\alpha}), \quad (19)$$

где α индексирует ячейку расчетной сетки с размером γ_{α} в скоростном пространстве. Тогда для дискретной функции распределения (19) интеграл столкновений запишется в следующем виде:

$$I(\vec{v}) = - \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha} \gamma_{\alpha} f_{\beta} \gamma_{\beta} \sigma(|\vec{v}_{\alpha} - \vec{v}_{\beta}|) |\vec{v}_{\alpha} - \vec{v}_{\beta}| \times \\ \times \left\{ [\delta(\vec{v} - \vec{v}_{\alpha}) + \delta(\vec{v} - \vec{v}_{\beta})] - \frac{w_{\alpha'}}{4\pi} \sum_{\alpha'} [\delta(\vec{v} - \vec{v}_{\alpha'}) + \delta(\vec{v} - \vec{v}_{-\alpha'})] \right\}, \quad (20)$$

где

$$\vec{v}_{\alpha'} = \frac{\vec{v}_{\alpha} + \vec{v}_{\beta}}{2} + \frac{|\vec{V}|}{2} \vec{n}_{\alpha'}, \\ \vec{v}_{-\alpha'} = \frac{\vec{v}_{\alpha} + \vec{v}_{\beta}}{2} - \frac{|\vec{V}|}{2} \vec{n}_{\alpha'}. \quad (21)$$

Множество пар антиколлинеарных векторов $(n_{\alpha'}, n_{-\alpha'})$, коллинеарных вектору относительной скорости после столкновения, задают узлы квадратуры на сфере, $w_{\alpha'}$ - веса квадратуры. При расчетах использовались несколько квадратурных формул, инвариантных по отношению к группам вращения правильных многогранников с инверсией [9]-[10]. Это формула икосаэдра с 12 узлами - вершинами икосаэдра (FI-12), формула октаэдра 5-го порядка алгебраической точности (квадратура дает точное значение интеграла

Таблица 1: Параметры квадратуры FO-14

Узлы	Веса/ 4π	Комментарии
$(\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)$	1/15	Вершины октаэдра
$(\pm 1/\sqrt{3}, \pm 1/\sqrt{3}, \pm 1/\sqrt{3})$	3/40	Центры граней

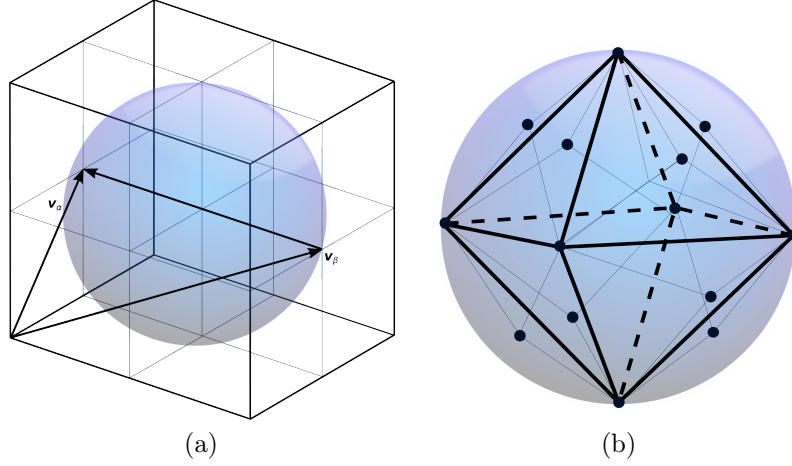


Рис. 1: Фрагмент расчетной сетки и узлы квадратуры FO-14 на сфере

для всех многочленов степени не выше 5) с 14 узлами (FO-14), формула октаэдра 5-го порядка алгебраической точности с 26 узлами (FO-26). В таблицах 1-4 приводятся характеристики упомянутых квадратур.

На рисунке 1 изображены узлы квадратуры на сфере для одной пары узлов прямоугольной расчетной сетки (для квадратуры FO-14).

Таблица 2: Параметры квадратуры FO-26

Узлы	Веса/ 4π	Комментарии
$(\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)$	1/21	Вершины октаэдра
$(\pm 1/\sqrt{3}, \pm 1/\sqrt{3}, \pm 1/\sqrt{3})$	9/280	Центры граней
$(\pm \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}), (0, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}), (\pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, 0)$	4/105	Центры ребер октаэдра

Таблица 3: Параметры квадратуры FI-12

Узлы	Веса/ 4π	Комментарии
$(\pm X, 0, \pm Z), (0, \pm Z, \pm X), (\pm Z, \pm X, 0)$	1/12	Вершины икосаэдра. $\phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$, $X = \frac{1}{\sqrt{1+\phi^2}}, Z = X\phi$

В соответствие с формулой (20) алгоритм вычисления интеграла столкновений можно представить следующим образом. Для каждой пары $\vec{v}_\alpha, \vec{v}_\beta$ узлов расчетной сетки в скоростном пространстве вычисляем величину

$$\Delta N_{\alpha,\beta} = f_\alpha \gamma_\alpha f_\beta \gamma_\beta \sigma(|\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta|) |\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta|. \quad (22)$$

Суммируя отдельно $-\Delta N_{\alpha,\beta}/\gamma_\alpha$ и, соответственно, $-\Delta N_{\alpha,\beta}/\gamma_\beta$, накапливаем в узлах \vec{v}_α и \vec{v}_β отрицательное изменение фазовой плотности в единицу времени. Далее, распределяем потери в этих узлах в узлы квадратуры на сфере $\vec{v}_{\alpha i}$ и $\vec{v}_{\beta i}$. Как правило, узлы квадратуры на сфере не совпадают с узлами расчетной сетки, в которых должен быть вычислен интеграл столкновений, поэтому требуется раздать значения в узлах квадратуры на сфере в ближайшие узлы расчетной сетки в скоростном пространстве. При этом

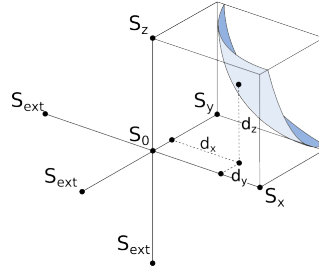


Рис. 2: Распределение массы в узлы скоростной сетки

необходимо, чтобы процедура раздачи сохраняла массу, импульс и энергию. Впервые раздача такого типа, консервативная раздача, была предложена в работе [?]. С точки зрения производительности более предпочтительной является процедура, предложенная в [12], у неё меньшая вычислительная сложность. На рисунке 2, иллюстрирующем эту процедуру, отдельно изображен один из узлов квадратуры на сфере, являющийся по отношению к расчетной сетке в скоростном пространстве междуузловой точкой. Доля интеграла

столкновений, связанная с узлом на сфере $\mathbf{v}\alpha_i$, раздается в ближайший узел и соседние узлы расчетной сетки в соответствии со следующими формулами:

$$\begin{cases} s_0 = 1 - d_x^2 - d_y^2 - d_z^2, \\ s_{ext} = -\frac{1}{6}(d_x + d_y + d_z - d_x^2 - d_y^2 - d_z^2), \\ s_x = d_x + s_{ext}, \\ s_y = d_y + s_{ext}, \\ s_z = d_z + s_{ext}, \end{cases} \quad (23)$$

где $s_0, s_x, s_y, s_z, s_{ext}$ - доли распределения массы по соответствующим узлам.

Результаты численного моделирования

Обтекание плоской пластины

Задача об обтекании плоской пластины под нулевым углом атаки является классической стационарной задачей динамики разреженного газа. Расчёты проводились для монокатомного газа твёрдых шаров (то есть когда вязкость и температура связаны соотношением $\mu \sim \sqrt{T}$). Число Кнудсена в набегающем потоке по пластине $Kn = 0.1$, число Маха $M = 2$. Физическое пространство содержало 192×81 ячеек, пространство скоростей - 16^3 , таким образом полное количество ячеек в 5ти мерном фазовом пространстве составило 6.3×10^7 . Использовалось 18 видеокарт Tesla M2090. Вычисления потребовали 50 часов машинного времени.

Проведено сравнение с методом ПСМ (прямого статистического моделирования). В расчётах методом ПСМ использовалось 3×10^6 модельных частиц и 300000 столкновительных ячеек.

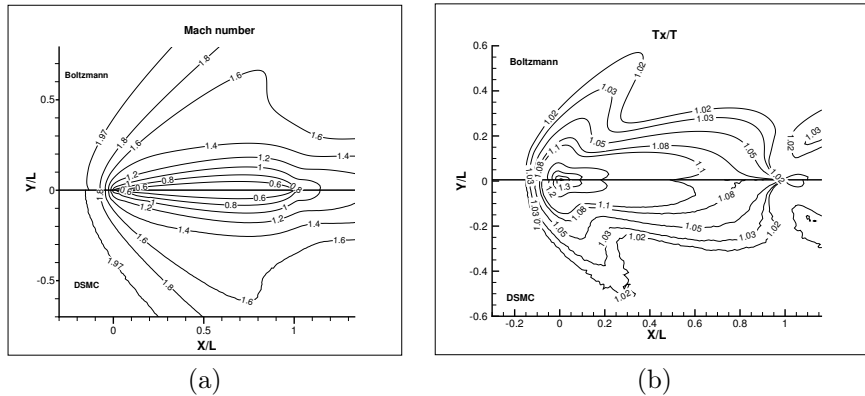


Рис. 3: Число Маха M (а) отношение продольной температуры к полной температуре T_x/T (б).

Число Маха и отношение продольной компоненты температуры к полной, полученные обоими методами изображены на Рис. 3. Имеет место хорошее согласие, однако Изолинии, полученные методом прямого решения уравнения Больцмана, более гладкие. Это объясняется статистическим шумом, неизбежно возникающим, при расчётах методом ПСМ.

Распад разрыва в микроканале

Другая классическая задача динамики разреженного газа, задача о распаде разрыва в микроканале, представляет существенно больший интерес, поскольку является нестационарной. Как уже было сказано выше, в отличие от детерминированного подхода, метод ПСМ испытывает значительные трудности при попытке получить гладкие изолинии.

Отношение длины канала к полуширине составляло $L/H = 24$. Расчёты проводились для монокатомного газа твёрдых шаров (то есть когда вязкость и температура связаны соотношением $\mu \sim \sqrt{T}$). В начальный момент времени канал разделён на две части диафрагмой, которая затем убирается. По обе стороны диафрагмы находится газ под разным давлением. Отношение давлений составляло $p_4/p_1 = 11.9$, число Кнудсена в газе с меньшим давлением, вычисленный по полуширине канала - $Kn = 0.1$. Физическое пространство содержало 1270×64 ячеек, пространство скоростей - 16^3 , таким образом полное количество ячеек в 5ти мерном фазовом пространстве составило 3.3×10^8 . Использовалось 24 видеокарт Tesla M2090. Вычисления потребовали 120 часов машинного времени. Проведено сравнение с методом ПСМ(прямого статистического моделирования). В расчётах методом ПСМ использовалось 10^9 модельных частиц и 1.5×10^6 столкновительных ячеек, осреднение проводилось по 100 шагам. Расчёты методом ПСМ потребовали 100 часов машинного времени.

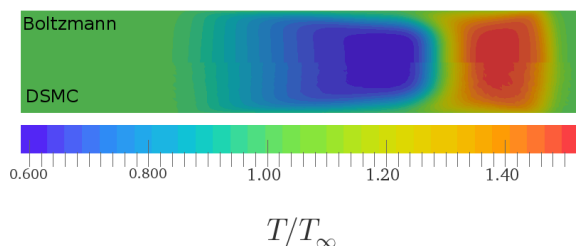


Рис. 4: Поле температуры.

Поле температуры, полученное этими двумя подходами, показано на Рис. 4. Имеет место хорошее качественное совпадение.

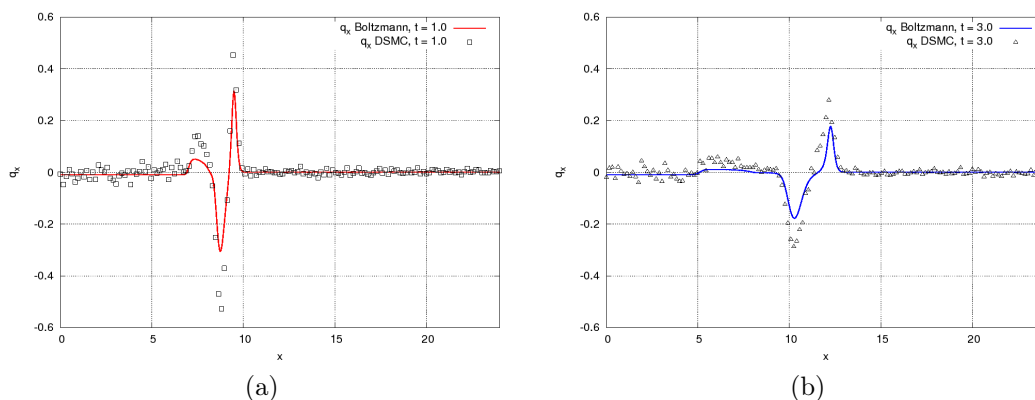


Рис. 5: Поток тепла при $t = 1.0$ (a) и $t = 3.0$ (b).

Более детально, рассмотрим профили теплового потока вдоль линии симметрии (Рис. 5). На графиках, полученных методом ПСМ, хорошо видно наличие статистических шумов, в то время как графики, полученные прямым численным решением уравнения Больцмана, являются существенно более гладкими.

Эффект от использования кластера

До появления гибридных кластеров моделирование течений разреженного газа на основе непосредственно численного решения уравнения Больцмана было невозможно. Кластер позволил перейти от моделирования одномерных задач к двумерным (а на самом деле 5ти мерным, если считать пространство скоростей), и даже к двумерным нестационарным течениям, что потребовало колоссальных ресурсов (десятки видеокарт Tesla M2090).

Перечень публикаций

- Malkov, E.A., Bondar, Y.A., Kokhanchik, A.A., Poleshkin S.O., Ivanov M.S. High-accuracy deterministic solution of the Boltzmann equation for the shock wave structure // Shock Waves (2015) 25: 387. <https://doi.org/10.1007/s00193-015-05>
- Malkov E.A., Poleshkin S.O., Kudryavtsev A.N., Shershnev A.A. Numerical approach for solving kinetic equations in two-dimensional case on hybrid computational clusters // AIP Conference Proceedings. - Vol.1770. -S.l., 2016. -030077 p. DOI: 10.1063/1.4964019
- Poleshkin S.O., Malkov E.A., Kudryavtsev A.N., Shershnev A.A., Bondar Y.A., Kohanchik A.A. Simulation of 2D rarefied gas flows based on the numerical solution of the Boltzmann equation // AIP Conference Proceedings. -Vol.1893, No.1. -S.l.: AIP Publishing, 2017. -030050 p. DOI: 10.1063/1.5007508

Список литературы

- [1] C. Cercignani, "Mathematical methods in Kinetic theory". McMillan, 1969.
- [2] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross and M.A. Krook, Phys. Rev. 94, 511-525 (1954).
- [3] E.M. Shahov, Izvestiya Akademii Nauk SSSR. Mekhanika Zhidkosti i Gaza 5, 142-145 (1968).
- [4] Y. Zheng and H. Struchtrup, Physics of Fluids 17, 103-127 (2006).
- [5] G.A. Bird, Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flow (Clarendon Press, Oxford, 1994), p. 458.
- [6] M.S. Ivanov and S.V. Rogazinskij, USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics 28, 64-71 (1988).
- [7] Bondar Ye.A., Gimelshein S.F., Markelov G.N., Ivanov M.S. Direct statistical Monte Carlo simulation of the shock-wave structure in dissociating gas // Thermophysics and Aeromechanics. - 2006. -Vol.13, No.2. -P. 239-256.
- [8] Shevyrin A.A., Bondar Ye.A., Kashkovsky A.V., Ivanov M.S. Application of the DSMC method to high-temperature nonequilibrium flows with chemical reactions // 16th International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR'2012) (Kazan, Russia, 19 - 25 Aug., 2012)
- [9] Попов А.С. Поиск наилучших кубатурных формул для сферы, инвариантных относительно группы вращений октаэдра с инверсией // Сиб. журн. вычисл. математики 2005. Т. 8, N.2. С. 143-148.
- [10] Попов А.С. Поиск наилучших кубатурных формул для сферы, инвариантных относительно группы вращений октаэдра // Сиб. журн. вычисл. математики 2002. Т. 5. N.4. С.367-372
- [11] Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Рябченков В.В., Черемисин Ф.Г. Система программных модулей для вычисления интеграла столкновений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2011. Т.12. С.40-47.
- [12] P.L. Varghese, "Arbitrary post-collision velocities in a discrete velocity scheme for the Boltzmann equation," in: Rarefied Gas Dynamics: Proc of the 25th Intern. Symposium, edited by M.S. Ivanov and A.K. Rebrov, Novosibirsk, Russia, pp. 225-232 (2005).