

УДК 533.70

РАЗРАБОТКА РЕШАТЕЛЯ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ К ИНЖЕНЕРНЫМ ЗАДАЧАМ

А.А. Синер¹, Е.В. Коромыслов², А.М. Сипатов¹¹ОАО «Авиадвигатель», Пермь, Россия²Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия

Представлены результаты работы коллектива авторов по созданию решателя полного уравнения Больцмана. Для дискретизации пространства скоростей применяются декартовы сетки с узлами, расположенными в вершинах гиперкуба. При вычислении интеграла столкновений используется как релаксационная модель, так и спектральный метод вычисления, разработанный И.В. Ибрагимовым. Реализован быстрый алгоритм Фурье для спектрального метода вычислений интеграла столкновений. Решатель тестируется на задаче распада произвольного разрыва и модельной задаче релаксации газа из неравновесного состояния. Исследуются некоторые свойства решателя при измельчении сетки в пространстве скоростей, в геометрическом пространстве, а также при различных значениях времени релаксации. Показана высокая эффективность распараллеливания решателя на основе технологии OpenMP. Создаваемый программный комплекс представляет собой перспективную замену решателям, основанным на уравнениях Навье–Стокса и предназначенным для решения задач до- и сверхзвуковой аэродинамики.

Ключевые слова: уравнение Больцмана, аппроксимация Батнагара–Гросса–Крука, интеграл столкновений, релаксационная модель

DEVELOPMENT OF A BOLTZMANN SOLVER FOR ENGINEERING PROBLEMS

А.А. Siner¹, E.V. Koromyslov² and A.M. Sipatov¹¹OJSC «Aviadvigatel», Perm, Russia²Perm State National Research University, Perm, Russia

We describe the development of a full Boltzmann equation solver. Cartesian grids with nodes located at hypercube corners are used to discretize the velocity space. Both the relaxation model and the spectral method proposed by Ibragimov are used to calculate the collision integral. The fast Fourier algorithm for the spectral method of the collision integral calculation is implemented. The solver under development is tested for the one-dimensional shock wave problem (Sod test) and for the simple relaxation problem. The properties of the solver are investigated with respect to velocity cell size, space cell size and relaxation time. The high parallel efficiency of the solver is shown using OpenMP technology. The solver is a challenging alternative to the software based on the Navier–Stokes equation for sub- and supersonic aerodynamic problems.

Key words: Boltzmann equation, Bhatnagar–Gross–Krook approximation, collision integral, relaxation model

1. Введение

Решение сложных технических задач, возникающих перед современными исследователями, требует активной разработки самых разнообразных математических моделей. Как правило, течения газа в технических устройствах описываются уравнениями Эйлера и Навье–Стокса (феноменологический подход) [1]. Однако в последние годы для этой цели все чаще применяется статистический подход, основанный на уравнении Больцмана [2]. Например, в работе [3] представлено исследование перехода к неустойчивому течению в сверхзвуковой недорасширенной струе. Обширный обзор работ по приложению уравнений Больцмана к решению ряда фундаментальных и прикладных задач можно найти в [2, 4]. Необходимо отметить, что в основном речь идет

о так называемом решетчатом уравнении Больцмана (Lattice Boltzmann Equation) [4, 5]. При таком подходе для аппроксимации функции распределения в пространстве скоростей используется набор узлов, именуемый решеткой. Количество узлов в таких решетках невелико, порядка 10–20.

В настоящей работе применяется более точная аппроксимация интеграла столкновений на декартовой сетке в пространстве скоростей (в иностранной литературе такие модели называются дискретными скоростными моделями (Discrete Velocity Models) [6]). Сетка насчитывает n^3 узлов в каждой геометрической точке (n — количество узлов по одному скоростному направлению; чаще всего $n = 16$, $n = 32$). Также в работе приводятся решения модельных тестовых задач, показывающие возможности подхода Больцмана, являющегося альтернативой более традиционным уравнениям Навье–Стокса.

2. Математическая постановка задач в теории Больцмана

Классическое кинетическое уравнение Больцмана имеет вид:

$$f_t + \vec{v} \cdot \nabla f = Q(f, f), \quad (1)$$

где интеграл столкновений $Q(f, f)$ вычисляется по формуле:

$$Q(f, f)(v) = \int_{R^3} \int_{S^2} B(|v-w|, \theta) [f(v')f(w') - f(v)f(w)] dedw. \quad (2)$$

Здесь f и f_t — функция распределения частиц в пространстве скоростей и ее производная по времени, \vec{v} — вектор скорости движения частиц, v и v' — скорости первой молекулы до и после столкновения, w и w' — скорости второй молекулы до и после столкновения, R^3 — декартово пространство скоростей, S^2 — поверхность сферы единичного радиуса с центром в начале скоростного пространства; θ — угол рассеяния; функция $B(|v-w|, \theta)$, называемая ядром интеграла столкновений, определяет физические особенности взаимодействия молекул. Самой простой моделью ядра является модель максвелловских псевдомолекул $B(|v-w|, \theta) = 1/(4\pi)$ [7].

Для того чтобы задача стала замкнутой, уравнение (1) должно быть дополнено начальными и граничными условиями [2].

Макроскопические характеристики движения среды (плотность ρ , средняя скорость V и температура T) представляют собой статистические моменты (интегралы по скоростному пространству) функции распределения

$$\rho = \int_{R^3} f(v) dv, \quad V = (1/\rho) \int_{R^3} vf(v) dv, \quad T = (1/(3\rho)) \int_{R^3} |V-v|^2 f(v) dv. \quad (3)$$

Вид функции распределения, как известно, определяется состоянием среды. Так, если газ находится в термодинамическом равновесии, распределение молекул по скоростям подчиняется статистическому закону Максвелла:

$$f(v_x, v_y, v_z) = (\rho/(2\pi RT)) \exp \left\{ \left[-(v_x - v_1)^2 + (v_y - v_2)^2 + (v_z - v_3)^2 \right] / (2RT) \right\},$$

где R — универсальная газовая постоянная; v_x, v_y, v_z — компоненты скорости молекул; v_1, v_2, v_3 — компоненты скорости макроскопического движения; T — термодинамическая температура; ρ — плотность газовой среды.

3. Способы вычисления интеграла столкновений

Непосредственное вычисление столкновительного члена уравнения Больцмана по формуле (2) является очень сложной задачей из-за большой размерности интегрирования, поэтому были предложены некоторые более эффективные подходы. В данном разделе описываются только те из них, которые реализованы в разрабатываемом решателе.

3.1. Аппроксимация Бхатнагара–Гросса–Крука

Одной из первых упрощающих моделей для описания молекулярного взаимодействия в газе является аппроксимация Бхатнагара–Гросса–Крука [8]:

$$Q(f, f) = -\frac{1}{\tau}(f - f_0), \quad (4)$$

где τ — время релаксации, f_0 — равновесная функция распределения, зависящая от параметров среды.

3.2. Спектральный метод вычисления интеграла столкновений

Более точный подход к вычислению интеграла столкновений основывается на спектральных методах. Один из таких методов [9] для нахождения интеграла столкновений предлагает следующие формулы:

$$\begin{aligned} Q(f, f)(v) &= Q^+(f, f)(v) - Q^-(f, f)(v), \\ Q^+(f, f)(v) &= F_{y \rightarrow v} \left[\int_{R^3} T(u, y) F_{z \rightarrow y}^{-1} [f(z-u) f(z+u)](u, y) du \right] (v), \\ Q^-(f, f)(v) &= f(v) \int_{R^3} B_{tot}(|u|) f(w) dw. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $F_{y \rightarrow v} [g(y)]$, $F_{z \rightarrow y}^{-1} [g(z)]$ — прямое и обратное преобразования Фурье функции g в пространстве скоростей соответственно; $B_{tot}(|u|)$ — интеграл от ядра по углу рассеяния.

Для простых моделей межмолекулярного взаимодействия вида $B(|u|, \theta) = C_\alpha |u|^\alpha$ функция ядра $T(u, y)$ может быть найдена аналитически: $T(u, y) = 2^{5+\alpha} \pi C_\alpha |u|^\alpha \sin c((2\pi/N)|u||y|)$, где $\sin c(x) = (\sin x)/x$, α — показатель потенциала, C_α — масштабный множитель, N — количество точек по каждой из скоростных компонент.

Вычисление $Q^+(f, f)(v)$ удобно проводить в 4 этапа:

$$g^{(1)}(u, z) = f(z-u) f(z+u), \quad (6)$$

$$g^{(2)}(u, y) = F_{z \rightarrow y}^{-1} [g^{(1)}(u, z)], \quad (7)$$

$$g^{(3)}(y) = \int_{R^3} T(u, y) g^{(2)}(u, y) du, \quad (8)$$

$$Q^+(f, f)(v) = F_{y \rightarrow v} [g^{(3)}(y)]. \quad (9)$$

Этапы, определяемые формулами (7) и (9), могут быть существенно ускорены за счет использования алгоритма быстрого преобразования Фурье. При этом количество

точек в пространстве скоростей по каждому скоростному направлению должно быть кратно двойке.

Для проведения вычислений в пространстве скоростных переменных v, u, y определяется ортогональная равномерная сетка: $C_v = \{v_j = V + h_v j, j \in C_n\}$, $C_u = \{u_k = h_u k, k \in C_n\}$, $C_y = \{y_j = h_y j, j \in C'_n\}$. Здесь средняя скорость макроскопического движения $V = (v_1, v_2, v_3)$ вычисляется по формуле (3); шаги в физическом C_n и спектральном C'_n пространствах скоростей связываются соотношением: $h_v h_y = 2\pi/N$.

4. Численная схема

В дальнейшем для решения уравнения (1) с заданными граничными условиями используется схема с уменьшением полной вариации (Total Variation Diminution) — TVD-схема — по пространственным производным и явная схема Эйлера или Рунге–Кутты по времени.

Формулы для вычисления производной по пространству

$$F\left(t_{n-1}, x_i, (v_x)_{i_v}, (v_y)_{j_v}, (v_z)_{k_v}\right) = -\frac{\partial(v_x f)}{\partial x}\left(t_{n-1}, x_i, (v_x)_{i_v}, (v_y)_{j_v}, (v_z)_{k_v}\right), \quad (10)$$

с применением TVD-схемы имеют вид [10]:

$$F\left(t_{n-1}, x_i, (v_x)_{i_v}, (v_y)_{j_v}, (v_z)_{k_v}\right) = -(h_{i+1/2} - h_{i-1/2})/\Delta x, \quad \text{где } \Delta x \text{ — шаг пространственной}$$

конечно-разностной сетки, $h_{i+1/2} = F_{i+1/2}^L + F_{i+1/2}^R$, $h_{i-1/2} = F_{i-1/2}^L + F_{i-1/2}^R$,

$$F_{i+1/2}^L = F_i^+ + (1/2) \min \text{mod}(\Delta F_{i+1/2}^+, \Delta F_{i-1/2}^+), \quad F_{i-1/2}^L = F_{i-1}^+ + (1/2) \min \text{mod}(\Delta F_{i-1/2}^+, \Delta F_{i-3/2}^+),$$

$$F_{i+1/2}^R = F_{i+1}^- - (1/2) \min \text{mod}(\Delta F_{i+1/2}^-, \Delta F_{i+3/2}^-), \quad F_{i-1/2}^R = F_i^- - (1/2) \min \text{mod}(\Delta F_{i-1/2}^-, \Delta F_{i+1/2}^-),$$

$$F_i^+ = (1/2)(v_i + |v_i|)f_i, \quad F_{i+1}^+ = (1/2)(v_{i+1} + |v_{i+1}|)f_{i+1}, \quad F_{i-1}^+ = (1/2)(v_{i-1} + |v_{i-1}|)f_{i-1},$$

$$F_{i-1}^- = (1/2)(v_{i-1} - |v_{i-1}|)f_{i-1}, \quad F_i^- = (1/2)(v_i - |v_i|)f_i, \quad F_{i+1}^- = (1/2)(v_{i+1} - |v_{i+1}|)f_{i+1},$$

$$\Delta F_{i-1/2}^- = F_i^- - F_{i-1}^-, \quad \Delta F_{i+1/2}^- = F_{i+1}^- - F_i^-, \quad \Delta F_{i+3/2}^- = F_{i+2}^- - F_{i+1}^-, \quad \Delta F_{i-3/2}^+ = F_{i-1}^+ - F_{i-2}^+,$$

$$\Delta F_{i-1/2}^+ = F_i^+ - F_{i-1}^+, \quad \Delta F_{i+1/2}^+ = F_{i+1}^+ - F_i^+.$$

Все формулы содержат сокращенную запись для функции распределения: $f_i = f\left(t_{n-1}, x_i, (v_x)_{i_v}, (v_y)_{j_v}, (v_z)_{k_v}\right)$. Входящая в формулы функция $\min \text{mod}$ возвращает минимальный из модулей своих аргументов, то есть

$$\min \text{mod}(x, y) = \begin{cases} |x|, & \text{если } |x| < |y| \\ |y|, & \text{если } |x| > |y| \end{cases}.$$

Интегрирование по времени при решении тестовых задач, рассматриваемых в следующем разделе, будет проводиться по классической схеме Эйлера 1-го порядка точности (в дальнейшем — Схема 1) с шагом Δt :

$$f_{(i_v, j_v, k_v)}^{n+1} = f_{(i_v, j_v, k_v)}^n + \Delta t \left(Q_{(i_v, j_v, k_v)}^n + F_{(i_v, j_v, k_v)}^n \right). \quad (11)$$

Величина $F_{(i_v, j_v, k_v)}^n$ представляет собой аппроксимацию конвективного слагаемого (если оно учитывается) по формуле (10). При решении пространственно-однородного уравнения Больцмана полагается $F_{(i_v, j_v, k_v)}^n = 0$. В формуле (11) $Q_{(i_v, j_v, k_v)}^n$ — это значение интеграла

столкновений в точке скоростного пространства (i_v, j_v, k_v) на временном слое n , вычисляемое с помощью формул (4) или (5) в зависимости от выбранной аппроксимации.

Для аппроксимации производной по времени в некоторых случаях также будет применяться двухшаговая схема Рунге-Кутты 2-го порядка точности (Схема 2):

$$f_{(i_v, j_v, k_v)}^{n+(1/2)} = f_{(i_v, j_v, k_v)}^n + (\Delta t/2) \left(Q_{(i_v, j_v, k_v)}^n + F_{(i_v, j_v, k_v)}^n \right), \quad f_{(i_v, j_v, k_v)}^{n+1} = f_{(i_v, j_v, k_v)}^n + \Delta t \left(Q_{(i_v, j_v, k_v)}^{n+(1/2)} + F_{(i_v, j_v, k_v)}^{n+(1/2)} \right).$$

$$\text{Здесь } Q_{(i_v, j_v, k_v)}^n = Q_{(i_v, j_v, k_v)}(f^n, f^n), \quad Q_{(i_v, j_v, k_v)}^{n+(1/2)} = Q_{(i_v, j_v, k_v)}(f^{n+(1/2)}, f^{n+(1/2)}).$$

5. Решение тестовых задач

В данном разделе осуществляется тестирование реализованных в решателе методов, изложенных в разделе 3 на основе численных схем, указанных в разделе 4. Решается задача релаксации смеси газов из неравновесного состояния и классическая задача распада разрыва.

5.1. Задача релаксации смеси газов

Математическая постановка задачи. Пусть требуется описать процесс установления во времени газодинамических параметров смеси двух газов, имеющих следующие начальные параметры: $\vec{V}_0^{(k)} = (v_{10}^{(k)}, v_{20}^{(k)}, v_{30}^{(k)})$ — скорость, $T_0^{(k)}$ — температура, $\rho_0^{(k)}$ — плотность (идентификатор $k = 1$ — 1-й газ, $k = 2$ — 2-й газ). Для определенности предполагаем, что газы перемешиваются в равных количествах и имеют одинаковые физико-химические свойства, включая температуру и плотность ($T_0^{(1)} = T_0^{(2)} = 1$, $\rho_0^{(1)} = \rho_0^{(2)} = 1$), но различаются скоростями. Задачу будем решать в безразмерных переменных. Для обезразмеривания воспользуемся соотношениями:

$$T_{\text{разм}} = T T_*, \quad v_{\text{разм}} = v \sqrt{k T_* / m}, \quad t_{\text{разм}} = t / \sqrt{k T_* / m}. \quad (12)$$

Здесь $k = 1,83066 \cdot 10^{-23}$ — константа Больцмана, $m = 48,15566 \cdot 10^{-27}$ — масса молекулы газа (условная, осредненная по компонентам смеси величина, соответствующая воздуху), T_* — температура приведения.

Для моделирования процесса выравнивания параметров смеси применим пространственно однородное уравнение Больцмана (1) $\frac{\partial f}{\partial t} = Q(f, f)$ с начальным условием

$$f(0) = (1/2)(M_1 + M_2), \quad (13)$$

где M_1 и M_2 — распределения Максвелла для 1-го и 2-го газов соответственно, имеющие вид:

$$M_1(t, \vec{v}) = \exp\left[-|\vec{v} - \vec{V}_0^{(1)}| / (2T_0^{(1)})\right] / (2\pi T_0^{(1)})^{3/2}, \quad M_2(t, \vec{v}) = \exp\left[-|\vec{v} - \vec{V}_0^{(2)}| / (2T_0^{(2)})\right] / (2\pi T_0^{(2)})^{3/2}.$$

Поскольку рассматриваем равномерное в геометрическом пространстве распределение параметров газовой смеси, решение будет зависеть только от скорости и времени, то есть $f = f(t, \vec{v})$. В качестве начального распределения скоростей возьмем $\vec{V}_0^{(1)} = (-2, 2, 0)$, $\vec{V}_0^{(2)} = (2, 0, 0)$ и зададим температуру приведения: $T_* = 300 \text{ К}$.

Аналитическое решение для моментов функции распределения. В работе [11] получено точное решение для моментов функции распределения: $\rho(t) = \rho_0$, $m(t) = m_0$, $M(t) = M_0 e^{-t/2} + (TI + VV^T)(1 - e^{-t/2})$, $r(t) = r_0 e^{-t/3} + (5T + |V|^2)V(1 - e^{-t/3}) + 2(M_0 - VV^T - TI) \times$

$\times V(e^{-t/2} - e^{-t/3})$, где I — единичная матрица; здесь и далее верхний индекс «Т» обозначает операцию транспонирования. В силу использования однородного уравнения Больцмана энергия в пространстве сохраняется, в связи с этим и температура среды также остается постоянной: $T(t) = T_0$.

Моменты функции распределения вычисляем по формулам:
 $\rho = \int f(\vec{v}) d\vec{v}$, $\vec{m} = \int \vec{v} f(\vec{v}) d\vec{v}$, $M = \int \vec{v} \vec{v}^T f(\vec{v}) d\vec{v}$, $\vec{r} = \int \vec{v} |\vec{v}|^2 f(\vec{v}) d\vec{v}$.

В случае, когда начальная функция распределения имеет вид (13), начальные моменты становятся равными: $\rho_0 = 1$, $\vec{m}_0 = \rho_0 \vec{v}_0 = (1/2)(\vec{V}_0^{(1)} + \vec{V}_0^{(2)})$,

$$M_0 = \left[(T_0^{(1)} + T_0^{(2)}) I + \vec{V}_0^{(1)} (\vec{V}_0^{(1)})^T + \vec{V}_0^{(2)} (\vec{V}_0^{(2)})^T \right] / 2, \quad \vec{r}_0 = \left[(5T_0^{(1)} + |\vec{V}_0^{(1)}|^2) \vec{V}_0^{(1)} + (5T_0^{(2)} + |\vec{V}_0^{(2)}|^2) \vec{V}_0^{(2)} \right] / 2.$$

Для вычисления температуры используем формулу [11]:
 $T_0 = (1/2)(T_0^{(1)} + T_0^{(2)}) + (1/12) |\vec{V}_0^{(1)} - \vec{V}_0^{(2)}|^2$.

При подстановке значений параметров, заданных в постановке задачи, получим:
 $T = T_0 = 8/3$, $\rho = 1$, $m_1 = 0$, $m_2 = 1$, $m_3 = 0$, $M_{11} = 8/3 + 7/3 \cdot e^{-t/2}$, $M_{22} = 11/3 - 2/3 \cdot e^{-t/2}$,
 $M_{33} = 8/3 - 5/3 \cdot e^{-t/2}$, $M_{12} = M_{21} = -2e^{-t/2}$, $M_{13} = M_{31} = 0$, $M_{23} = M_{32} = 0$, $r_1 = -2e^{-t/2}$,
 $r_2 = 43/6 - 2/3 \cdot e^{-t/2}$, $r_3 = 0$.

Численное решение задачи. Для вычисления интеграла столкновений применим описанный выше спектральный метод, а для интегрирования по времени — Схемы 1 и 2.

Отметим, что при решении поставленной задачи наиболее сложным моментом является правильное определение столкновительного члена. И это, пожалуй, единственное с вычислительной точки зрения «слабое звено» во всей теории Больцмана. Вместе с этим, интеграл столкновений играет самую важную роль в уравнении Больцмана, так как отвечает за физику процесса. Само же уравнение, описывающее динамику газа, является очень простым, это уравнение переноса с источником членом (интегралом столкновений). Поскольку в настоящей работе используется спектральный метод, важно правильно выбирать область интегрирования и максимальную величину «сдвига» функций распределения в пространстве скоростей при вычислении компонент скорости $g_{ml}^{(1)}$.

Исследуем вопрос выбора максимального «сдвига» — величины U_{\max} , которая опосредованно входит в формулы (6) и (7). Проблема заключается в том, что интегрирование при практическом нахождении интеграла столкновений производится на конечном промежутке изменения значений скоростей. Теоретически же функция распределения определена на бесконечном множестве скоростей, как и функция $g^{(1)}$. Однако вычисление преобразования Фурье от функции $g^{(1)}$ производится для конечного промежутка. Кроме того, при больших значениях переменной u в формуле (7), как показывают расчеты, существенными становятся краевые эффекты, вызванные конечностью промежутка по скоростям. Значения функции $g^{(1)}$ в точках с наибольшим и наименьшим значением скорости становятся различными, а сама функция $g^{(1)}$ теряет периодичность. Вследствие этого при вычислении $g^{(2)}$ по формуле (7) появляется существенная ошибка. Погрешность вычисления $g^{(2)}$ еще больше увеличивается при грубой сетке в пространстве скоростей. Как правило, в расчетах используется сетка, содержащая 16 или 32 точки по каждой компоненте скорости. Данное ограничение связано с вычислительными ресурсами; расчет на сетке с 64 точками по каждой компоненте скорости потребовал бы значительно больше времени.

Ниже приводятся результаты численного расчета для различных величин «сдвига» по переменной u (для скоростей U_{\max}). На рисунке 1 показано изменение моментов M_{11} и M_{12} в зависимости от времени. Применяется дискретизация $16 \times 16 \times 16$ точек; максимальная безразмерная скорость равна 10; интегрирование по времени осуществляется по Схеме 2. Максимальная величина «сдвига» U_{\max} изменяется в диапазоне от 6 до 9 с шагом 1. Графики позволяют утверждать, что при проведении расчетов спектральным методом оптимальной с точки зрения точности является величина U_{\max} , изменяющаяся в диапазоне от 7 до 8. Об этом свидетельствуют графики, показанные на рисунке 1: в этом случае численное решение максимально близко расположено к аналитическому решению.

На рисунке 2 на примере момента M_{11} показано влияние на решение схемы интегрирования по времени. Видно, что Схема 1, имеющая 1-й порядок точности, дает более существенные погрешности, чем Схема 2 (2-го порядка). Даже при вдвое меньшем шаге по времени схема 1-го порядка не позволяет достигнуть точности, обеспечиваемой Схемой 2. Следовательно, в дальнейшем расчеты необходимо проводить с использованием схемы 2-го порядка или другой, более точной.

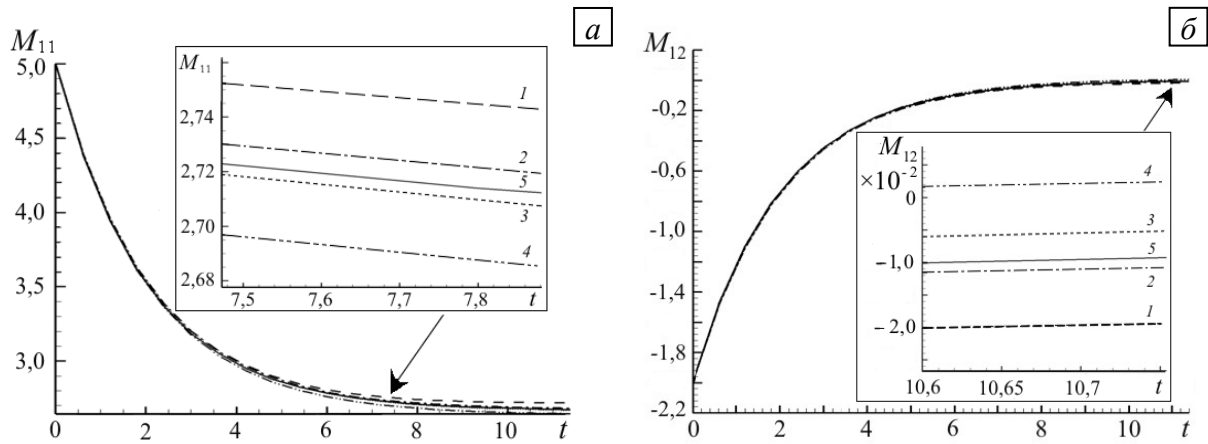


Рис. 1. Зависимость моментов M_{11} (а) и M_{12} (б) от времени для диапазона скоростей U_{\max} : 6 (кривая 1); 7 (2); 8(3); 9 (4); аналитическое решение (5)

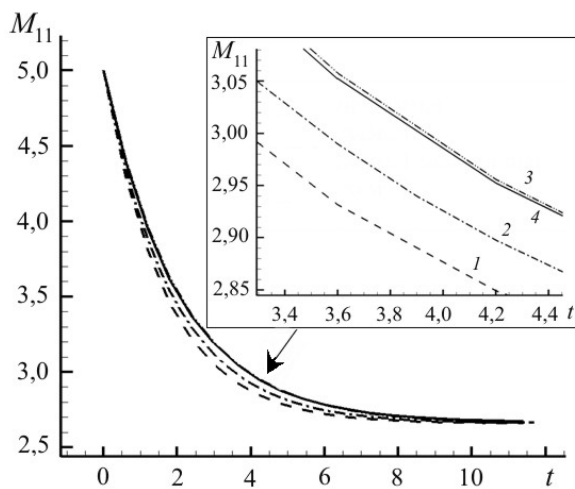


Рис. 2. Влияние схемы интегрирования по времени на величину момента M_{11} :
 Схема 1 (кривая 1);
 Схема 1 с мелким шагом (2);
 Схема 2 (3);
 аналитическое решение (4)

5.2. Задача распада разрыва

Математическая постановка. Рассматривается течение идеального газа в бесконечной узкой (с пренебрежимо малыми поперечными размерами) трубе, имеющей адиабатические стенки. Для определенности задача решается на ограниченном участке трубы длиной $L = 200$ м (Рис. 3). Чтобы смоделировать течение в бесконечной трубе, на концах расчетной области ставим условия выноса возмущений, которые получаем путем экстраполяции известных внутри трубы значений функции распределения. Непроницаемая мембрана делит трубу на равные части, которые заполнены разными газами. В начальный момент времени газы покоятся ($u_1 = u_2 = 0$) и имеют следующие параметры: слева от мембраны — $p_1 = 141855$ Па, $\rho_1 = 1,206$ кг/м³, $T_1 = 410,46$ К, справа от мембраны — $p_2 = 14185,5$ Па, $\rho_2 = 0,151$ кг/м³, $T_2 = 328,36$ К. В начальный момент времени происходит разрушение мембраны и газы начинают движение. Необходимо рассчитать распределение основных параметров смеси газов по длине трубы в различные моменты времени.

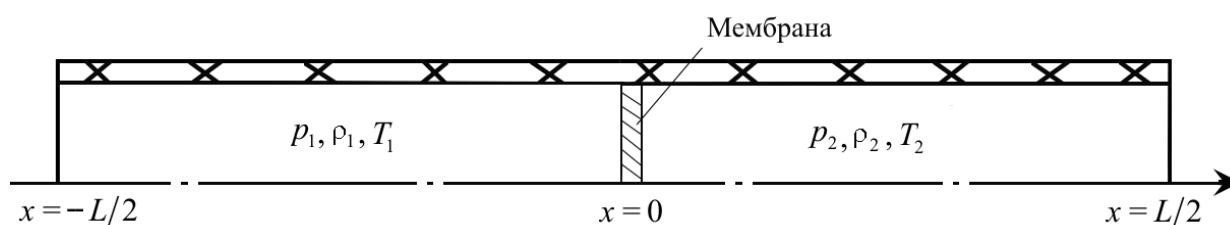


Рис. 3 Схема для задачи распада разрыва

В математической формулировке задачи используем уравнение Больцмана (1) с интегралом столкновений в форме Бхатнагара–Гросса–Крука (4) $\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{1}{\tau}(f - f_0)$ и равновесной функцией распределения вида $f_0(v_x, v_y, v_z) = [\rho / (2\pi RT)] e^{-((v_x - U)^2 + (v_y - V)^2 + (v_z - W)^2) / (2RT)}$, где U, V, W , — компоненты скорости в точке сплошной среды; T, ρ — макроскопические характеристики среды, R — универсальная газовая постоянная.

Начальную функцию плотности распределения запишем в форме распределения Максвелла, вычисленного по средним равновесным параметрам $p_1, \rho_1, T_1, p_2, \rho_2, T_2$:

$$f(0, x, v_x, v_y, v_z) = \begin{cases} [\rho_1 / (2\pi RT_1)] e^{-((v_x)^2 + (v_y)^2 + (v_z)^2) / (2RT_1)}, & -L/2 < x < 0; \\ [\rho_2 / (2\pi RT_2)] e^{-((v_x)^2 + (v_y)^2 + (v_z)^2) / (2RT_2)}, & 0 < x < L/2. \end{cases}$$

Для задания на удаленных концах трубы условий выноса возмущений проведем экстраполяцию нулевого порядка внутренних значений функции плотности распределения:

$$\begin{aligned} f(t, L/2, v_x, v_y, v_z) &= f(t, L/2 - \Delta x, v_x, v_y, v_z), \\ f(t, -L/2, v_x, v_y, v_z) &= f(t, -L/2 + \Delta x, v_x, v_y, v_z). \end{aligned}$$

Численное решение. Вычисления проводились для трех значений безразмерного (по аналогии с t , см. (12)) времени релаксации τ ($10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$) с дискретизацией по схеме TVD пространственных производных и по схеме 1-го порядка (Схема 1) для интегрирования по времени. Анализировалось влияние времени релаксации на решение.

Результаты расчета для момента времени $t = 0,11634$ приведены на рисунке 4. Показано распределение по длине трубы давления, плотности и скорости смеси газов. При расчете по уравнениям Больцмана использована сетка с 200 узлами. Также рисунок содержит распределения этих же параметров смеси, рассчитанные с помощью уравнений Эйлера. Уравнения Эйлера интегрировались по времени с применением схемы Рунге–Кутты 4-го порядка точности, производные вычислялись с помощью схемы DRP (Dispersion Relation Preserving), имеющей 4-й порядок точности. Пространственная сетка содержала 100 узлов.

Рисунок 5 демонстрирует зависимость решения уравнения Больцмана от количества узлов сетки. Наблюдается качественная схожесть распределений, полученных с помощью решения уравнения Эйлера и с помощью решения уравнения Больцмана. Некоторые отличия могут быть связаны со спецификой уравнения Больцмана.

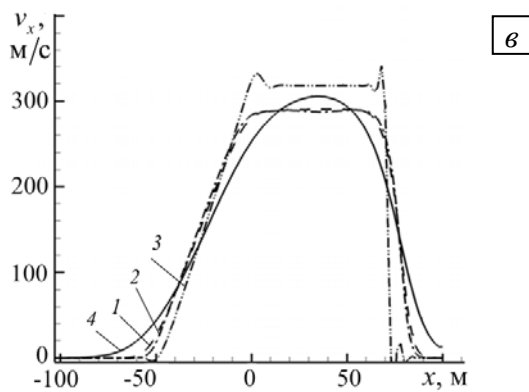
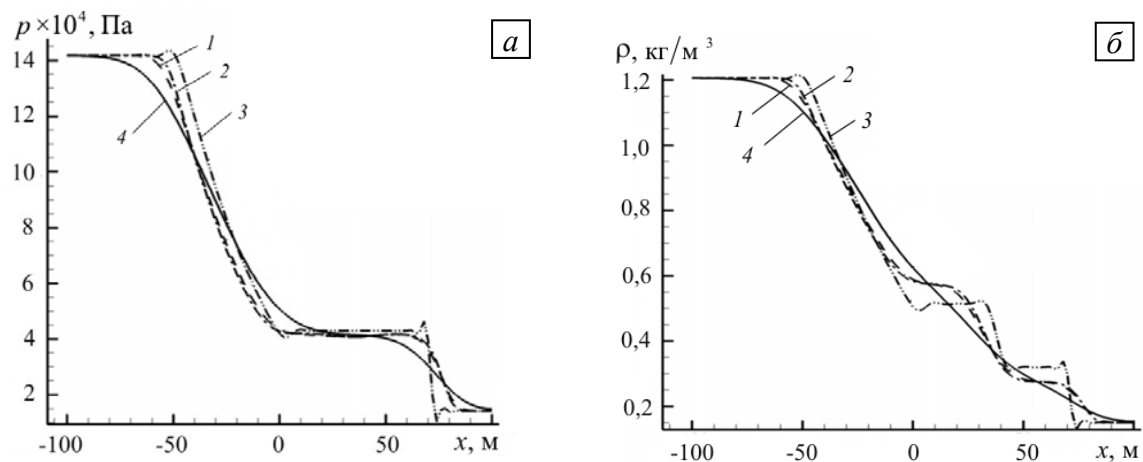


Рис. 4. Распределение по длине трубы давления (а), плотности (б) и скорости (в) для различного времени релаксации τ : 10^{-2} (кривая 1), 10^{-3} (2), 10^{-4} (3) – расчет на основе уравнения Больцмана и схемы TVD; кривая 4 – расчет на основе уравнения Эйлера

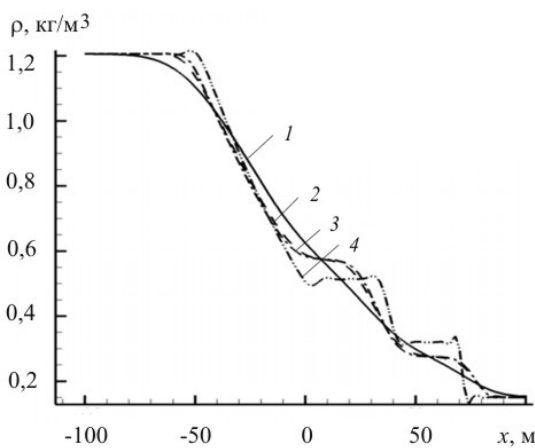


Рис. 5. Распределение плотности по длине трубы для различного количества узлов сетки: 100 (кривая 1), 200 (2), 1000 (3) – расчет на основе уравнения Больцмана и схемы TVD; кривая 4 – расчет на основе уравнения Эйлера

Использование технологии OpenMP для решения задачи распада разрыва. Решение уравнения Больцмана требует большого количества вычислений, которые могут быть произведены одновременно, поэтому перспективным является создание параллельных алгоритмов и разработка на их основе решателей. С точки зрения программирования в настоящее время существует широкий спектр параллельных вычислительных технологий: OpenMP, MPI, CUDA и другие. Для демонстрации эффективности применения параллельных вычислений в рассматриваемых в данной работе задачах был разработан решатель уравнения Больцмана на основе технологии OpenMP. На рисунке 6 приведена схема алгоритма для решения уравнения Больцмана. Пунктиром выделены параллельные регионы. Решатель реализован на компьютере с процессором IntelCore i7 (4 ядра, включенная опция HyperThreading) и может быть использован для проведения расчетов на процессорах класса IntelCore с различным количеством ядер.

Более подробно реализация вычислений на Этапе 1 показана на рисунке 7, а. Сначала организуется вспомогательный массив для хранения функции распределения на полушаге ($n-1/2$). При расчете в базовой формуле (11) учитывается только слагаемое,

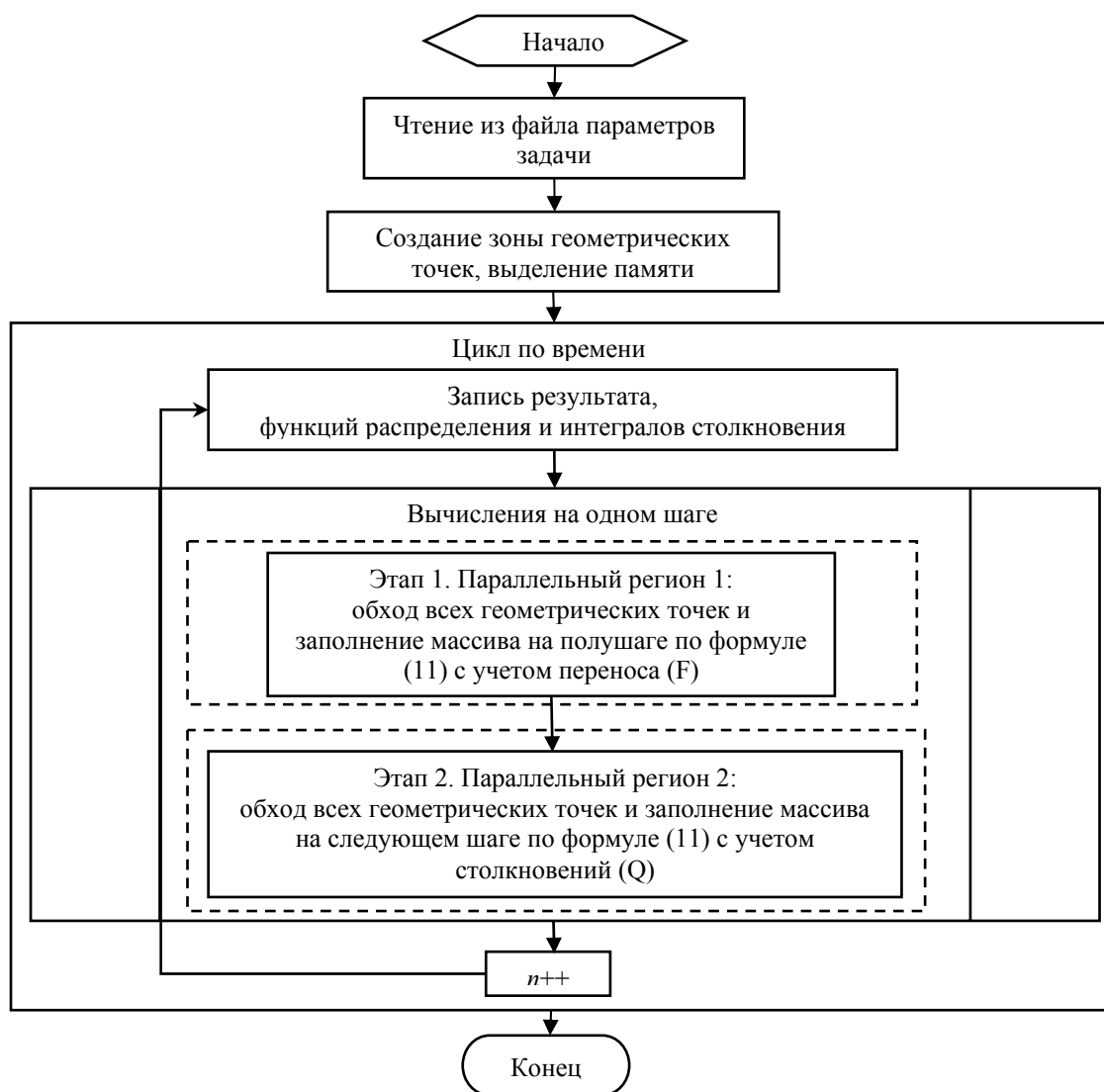


Рис. 6. Схема алгоритма решения

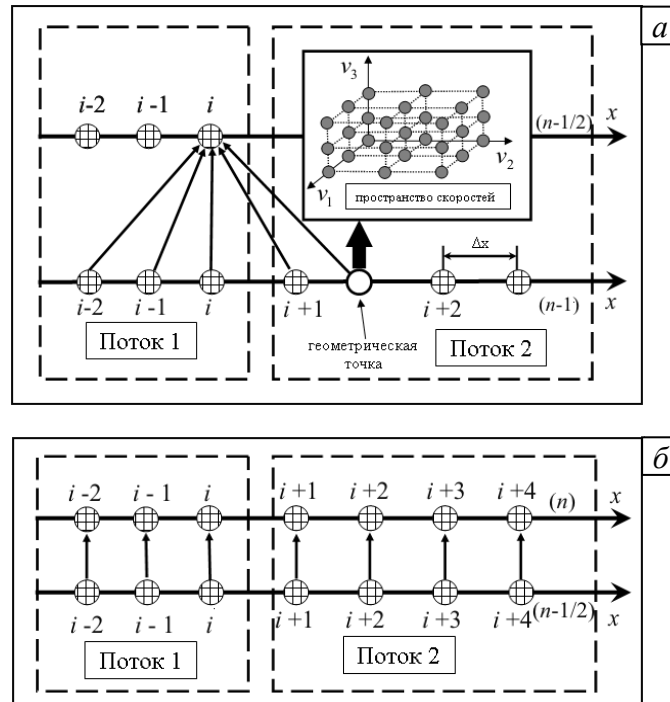


Рис. 7. Параллельные секции при распараллеливании по геометрическим точкам: Этап 1 – учет конвективного слагаемого (а); Этап 2 – учет столкновительного слагаемого (б)

отвечающее за перенос. Затем работа по заполнению массива данных на промежуточном полушаге становится параллельной: создаются независимые потоки, которые делят весь диапазон индексов на примерно равные части. Каждый поток вычисляет значения функции распределения на промежуточном полушаге только для своего выделенного диапазона индексов. В процессе расчета потоки могут брать друг у друга значения, найденные на предыдущем временном слое и имеющие индексы, не соответствующие тому или иному потоку. Таким образом, в каждой i -й точке пространства, обрабатываемой первым вычислительным потоком (Рис. 7, а), используются значения из $(i+1)$ -й и $(i+2)$ -й точек пространства, которые входят в зону ответственности второго потока. Однако второй поток, изменяя ячейки памяти на полушаге $(n-1/2)$, никак не влияет на значения искомым переменных, отвечающих текущему временному слою $(n-1)$. Таким образом, применение OpenMP позволяет не только получить верный результат, но и существенно сократить время вычислений

На рисунке 7, б показана схема работы потоков на Этапе 2. При вычислениях на этом этапе в формуле (11) принимается во внимание только столкновительное слагаемое. Значения функции распределения на полушаге $(n-1/2)$ позволяют определить значения на новом временном слое (n) . В результате при проведении всех манипуляций с данными в каждой точке используется всего два массива для функций распределения, которые поочередно обмениваются данными на двух этапах. Организация нескольких потоков одновременной и независимой обработки данных значительно ускоряет расчеты на Этапе 2.

Об эффективности распараллеливания решателя уравнений Больцмана можно судить по информации, которую содержит следующая далее Таблица. Здесь приведено время, затраченное на осуществление 1000 шагов по времени при дискретизации пространства скоростей сеткой с $16 \times 16 \times 16$ узлами; дискретизация геометрического пространства содержала 100 точек. Для вычисления интеграла столкновений использовано приближение Бхатнагара–Гросса–Крука. Задача делилась на 1, 2, 4 и 8 параллельных потоков. Потоки обрабатывались как различными ядрами, так и одним

ядром. Приведено время расчета с учетом и без учета записи промежуточных результатов вычислений на диск. Запись проводилась 1 раз за 100 шагов по времени.

Для оценки продуктивности разделения счета на потоки определялся коэффициент ускорения, который является отношением общего времени расчета ко времени расчета с использованием одного потока. Исходя из значения этого коэффициента оценивалась эффективность реализованного алгоритма. Для этого коэффициент ускорения делился на количество используемых параллельных процессов. Эффективность показывает, как ускоряется процесс расчета по сравнению с идеальной ситуацией, когда каждый поток в составе группы потоков работает максимально эффективно, независимо от других, и обмен данными между потоками отсутствует.

Таблица. Эффективность вычисления 1000 шагов по времени

Количество потоков	1	1	2	2	4	4	8
Номера ядер, задействованных в расчетах	автомат	1-е	1-е, 1-е	1-е, 2-е	1-е, 1-е, 2-е, 2-е	1-е, 2-е, 3-е, 4-е	Все
Время расчета без записи на диск, с	132	132	86	68	44	35	25
Время расчета с записью на диск, с	133	134	87	68	45	36	25
Коэффициент ускорения	-	-	1,535	1,941	3	3,771	5,28
Эффективность, %	-	-	76,8	97,1	75	94,3	66

Как видно из Таблицы, запись на диск практически не повлияла на время расчета. Разница между временем с учетом и без учета записи сопоставима с погрешностью измерений, поскольку измерения проводились с помощью обычного таймера, имеющегося в языке C, который отмеряет время в секундах. То, что разница мала, может быть объяснено небольшими объемами данных, записываемыми на диск в процессе счета. Обращение к диску имело место всего 10 раз, при этом за один сеанс запоминалось 643 Кб информации.

6. Анализ результатов

Решение задачи релаксации смеси газов показывает, что при использовании для расчета интеграла столкновений спектрального метода следует правильно выбирать величину максимального «сдвига» по скорости. В случае правильного выбора удовлетворительные результаты могут быть получены даже при дискретизации по времени на основе схемы первого порядка точности.

Анализ результатов решения второй тестовой задачи — задачи распада разрыва, позволяет заключить, что указанный метод решения уравнения Больцмана при аппроксимации интеграла столкновений по Бхатнагару–Гроссу–Круку качественно правильно описывает все наблюдаемые в ней характерные особенности (волну разряжения, ударную волну и контактный разрыв), но приводит к некоторым количественным расхождениям с классическим решением на основе уравнения Эйлера, а именно, получаются заниженные значения скоростей, что может быть связано с наличием реальной физической диссипации, которая учитывается в уравнении Больцмана и не принимается во внимание в уравнениях Эйлера. Это особенно хорошо подтверждается распределением скоростей (Рис. 4, в). Еще одним фактором, влияющим на погрешность, является порядок аппроксимации схемы по пространству и времени.

Описанный алгоритм решения уравнения Больцмана базируется на схемах 1-го порядка по времени и 2-го по пространству. При этом диссипативные свойства схемы

увеличиваются, и для получения более качественного решения требуется достаточно подробная сетка. Совершенствование алгоритма решения уравнения Больцмана и аппроксимации интеграла столкновений представляет предмет последующей работы.

7. Заключение

Полученные результаты решения тестовых задач дают основания утверждать, что разрабатываемый решатель после обобщения его на случай двух- и трехмерных по геометрическому пространству уравнений Больцмана открывает возможность решения ряда важных технических задач течения газа. Выявленные в процессе исследования задачи распада разрыва особенности, отличающие полученное в данной работе решение от решений с помощью феноменологического подхода (уравнений Эйлера), возможно, позволят выявить новые качества проектируемых технических устройств, увидеть явления, недоступные для исследователя, использующего традиционные уравнения Навье–Стокса и Эйлера.

Также следует отметить высокую эффективность распараллеливания разрабатываемого решателя, которая была продемонстрирована на задаче распада произвольного разрыва.

Литература

1. *Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В.* Теоретическая гидромеханика. – М.: Физматгиз, 1963. – Ч.1. – 584 с.
2. *Черчиньяни К.* Теория и приложения уравнения Больцмана. – М.: Мир, 1978. – 496 с.
3. *Аристов В.В., Забелок С.А.* Вихревая структура неустойчивой струи, изучаемой на основе уравнения Больцмана // Математическое моделирование. – 2001. – Т. 13, № 6. – С. 87-92.
4. *So R.M.C., Leung R.C.K., Fu S.C.* Modelled Boltzmann equation and its application to shock-capturing simulation // AIAA Journal. – 2008. – V. 46, N. 12. – P. 3038-3048.
5. *Chen S., Doolen G.D.* Lattice Boltzmann method for fluid flow // Annual Review of Fluid Mechanics. – 1998. – V. 30. – P. 329-364.
6. *Filbet F., Russo G.* High order numerical methods for the space non-homogeneous Boltzmann equation // Journal of Computational Physics. – 2003. – V. 186, N. 2. – P. 457-480.
7. *Bird G.A.* Molecular gas dynamics. – Oxford, Clarendon Press, 1976. – 238 p.
8. *Bhatnagar P. L., Gross E. P., and Krook M.* A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component system // Physical review. – 1954. – V. 94, N. 3. – P. 511-525.
9. *Ibragimov I., Rjasanow S.* Numerical solution of the Boltzmann equation on the uniform grid. Preprint № 63. – Saarbrücken, 2002. – 29 p.
10. *Qu K., Shu C., Chew Y. T.* Alternative method to construct equilibrium functions in lattice-Boltzmann method simulation of inviscid compressible flows at high Mach number // Physical Review E. – 2007. – V. 75, N. 3. (DOI: 10.1103/PhysRevE.79.036706)
11. *Krook M., Wu T.T.* Exact solutions of Boltzmann equation // Physics of Fluids. – 1977. – V. 20, N. 10. – P. 1589-1595.

Поступила в редакцию 11.10.10

Сведения об авторах

Синер Александр Александрович, инженер-конструктор-расчетчик, ОАО «Авиадвигатель», 614990, ГСП, Россия, Пермь, Комсомольский проспект, 93; E-mail: siner@avid.ru

Коромыслов Евгений Васильевич, студент, Пермский государственный национальный исследовательский университет (ПГНИУ), 614990, Россия, Пермь, ул. Букирева, 15; E-mail: keltrivera@gmail.com

Сипатов Алексей Матвеевич, ктн, начальник отдела, ОАО «Авиадвигатель»; E-mail: sipatov@avid.ru