

Отчет по выпускной квалификационной работе магистра, выполненной с использованием ИВЦ НГУ

"Решение кинетического уравнения Больцмана на графических ускорителях"

1 Состав коллектива

1. Евгений Александрович Малков, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник лаб. вычислительной аэродинамики ИТПМ СО РАН
2. Сергей Олегович Полешкин, студент 2го курса магистратуры ММФ НГУ

2 Научное содержание работы

Признанным методом расчета течений разреженного газа является метод прямого статистического моделирования (ПСМ), предложенный в работах Г. Берда и заметно усовершенствованный в работах М. С. Иванова и С. В. Рогазинского, обосновавших, так называемую, схему "мажорантной частоты". На основе метода ПСМ были разработаны программные комплексы, эффективно применяемые при расчетах высокоскоростных течений. Однако при расчетах медленных течений и нестационарных течений этот метод является неэффективным из-за статистического шума. В связи с этим, представляется важным подход к моделированию течений разреженного газа, основанный на детерминированных методах решения уравнения Больцмана. Начало разработки этих методов было положено в конце 70-х годов в работах В. В. Аристова и Ф. Г. Черемисина. Но только в последние 5-10 лет детерминированный подход стал бурно развиваться. Это связано с удешевлением и широким распространением мощных вычислительных систем, позволяющих решать нетривиальные задачи детерминированными методами, которые требуют очень больших вычислительных затрат. Узким местом при численном решении кинетического уравнения Больцмана является вычисление интеграла столкновений, оно занимает более 90 процентов времени выполнения программы. Диссертационная работа посвящена алгоритмической и программной оптимизации вычисления интеграла столкновений в одной из схем детерминированного метода решения уравнения Больцмана. Ввиду вышеизложенного понятна актуальность темы работы. Предложен и программно реализован адаптивный метод вычисления интеграла столкновений на основе сокращения количества узлов расчетной сетки в скоростном пространстве, отбираемых в качестве узлов квадратуры. Им были проведены тестовые расчеты для различных классов задач, которые показали примерно трехразовое ускорение. Проведенная оптимизация позволила в сокращенные сроки провести серию расчетов профиля ударной волны при больших числах Маха. Эти расчеты подтвердили существование в профиле особенности, локального максимума температуры вниз по потоку. Возможность существования этой особенности долгое время обсуждалась в литературе и полученный результат можно считать фундаментальным.

2.1 Постановка задачи

Уравнение Больцмана в одномерном случае:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} = St(f) \quad (2.1)$$

Начальные условия:

$$f|_{t=0} = \begin{cases} f_{n_1 T_1 v_1}^M, & x < L/4 \\ f_{n_2 T_2 v_2}^M, & x > L/4 \end{cases} \quad (2.2)$$

Условия на свободных границах:

$$f|_{x=0} = f_{n_1 T_1 v_1}^M \quad (2.3)$$

$$f|_{x=L} = f_{n_2 T_2 v_2}^M \quad (2.4)$$

Здесь $f_{\rho T v}^M$ — функция распределения Максвелла:

$$f_{n T v}^M(v_x, v_y, v_z) = \sqrt{\left(\frac{1}{2\pi T}\right)^3} \exp\left(-\frac{(v_x - v)^2 + v_y^2 + v_z^2}{2T}\right) \quad (2.5)$$

Отметим, что параметры n_1, T_1, v_1 и n_2, T_2, v_2 выбираются не произвольно. Они связаны условиями Ренкина-Гюгионо:

$$n_1 v_1 = n_2 v_2 \quad (2.6)$$

$$n_1(T_1 + v_1^2) = n_2(T_2 + v_2^2) \quad (2.7)$$

$$(C_p + 1)T_1 + \frac{v_1^2}{2} = (C_p + 1)T_2 + \frac{v_2^2}{2}, \quad (2.8)$$

где $C_p = i/2$ — теплоёмкость при постоянном давлении для газа с i степенями свободы.

2.2 Численные методы

Структура уравнения Больцмана отражает одно из предположений, положенных в основу физической модели разреженного газа, о независимости и аддитивности процессов свободномолекулярного переноса и однородной релаксации, что даёт возможность произвести расщепление по физическим процессам:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} \tilde{f} \quad (2.9)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = \frac{1}{Kn} \int_{R^3} d^3 v_1 \int_{S^2} (f' f'_1 - f f_1) |\vec{V}| \sigma(\vec{V}, \cos \theta) dS \quad (2.10)$$

Уравнение (2.9) описывает свободно-молекулярный перенос, а уравнение (2.10) — однородную релаксацию.

2.2.1 Свободномолекулярный перенос

Для расчёта этапа свободно-молекулярного переноса использовались схема второго порядка (2.11).

$$\frac{f_l^{n+1} - f_l^n}{\tau} = \begin{cases} -v_x \frac{3f_l^n - 4f_{l-1}^n + f_{l-1}^n}{2hvx}, & \text{при } v_x < 0 \\ -v_x \frac{-3f_l^n + 4f_{l+1}^n - f_{l+2}^n}{2hvx}, & \text{при } v_x \geq 0 \end{cases} \quad (2.11)$$

Здесь hvx — шаг сетки в скоростном пространстве по координате Vx .

2.2.2 Однородная релаксация

Запишем интеграл столкновений (??) в так называемой симметричной форме, удобной для построения консервативных схем его вычисления, сохраняющих массу, импульс и энергию:

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

где

$$\delta = (\delta(v - v'_1) + \delta(v - v'_2) - \delta(v - v_1) - \delta(v - v_2)) \quad (2.13)$$

Введём сетку в скоростном пространстве $R^3(v_x, v_y, v_z)$ (Рис. 2.1). Тогда сеточная аппрок-

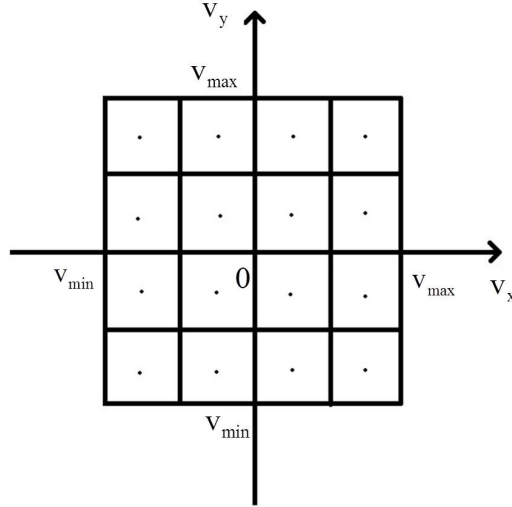


Рис. 2.1: двумерная иллюстрация сетки в скоростном пространстве

симация функции распределения принимает вид:

$$f(\vec{v}) = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \delta(\vec{v} - \vec{v}_{\alpha}), \quad (2.14)$$

где α индексирует узел в скоростном пространстве (Рис.2.1). Для расчётов интеграла на сфере использовалась следующая квадратурная формула. Пусть единичные векторы

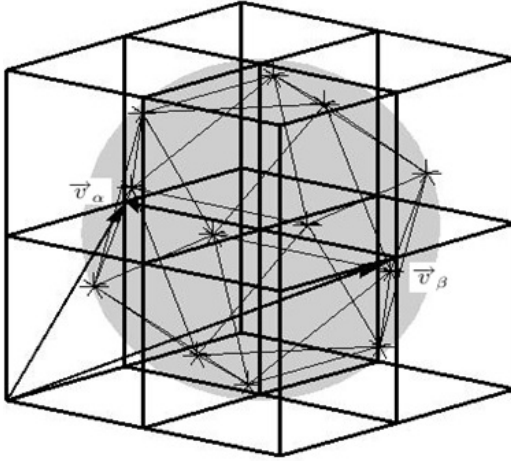


Рис. 2.2: узлы квадратуры на сфере и фрагмент расчётной сетки в скоростном пространстве

\vec{n}'_α задают 14 узлов квадратуры на сфере, а w'_α — веса узлов квадратуры (Рис. 2.2). В настоящей работе полагаем дифференциальное сечение рассеяния не зависящим от угла рассеяния. Запишем дискретную аппроксимацию дифференциального сечения рассеяния на сфере с диаметром $\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta$:

$$\sigma_{\alpha\beta\alpha'} = \frac{1}{4\pi} \sigma_1(|\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta|) \delta(\vec{n} - \vec{n}_{\alpha'}) w'_\alpha \quad (2.15)$$

Тогда для дискретной функции распределения (2.14) интеграл столкновений принимает вид:

$$I(v) = - \sum_{\alpha\beta} f_\alpha f_\beta \sigma_1(|\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta|) (\delta_{\alpha\beta} - \frac{1}{4\pi} \sum_{\alpha'} [\delta_{\alpha', -\alpha'}]), \quad (2.16)$$

где

$$\delta_{\alpha\beta} = \delta(\vec{v} - \vec{v}_\alpha) + \delta(\vec{v} - \vec{v}_\beta), \quad (2.17)$$

$$\vec{v}_{\alpha'} = \frac{\vec{v}_\alpha + \vec{v}_\beta}{2} + \frac{|\vec{V}|}{2} \vec{n}_{\alpha'}, \quad (2.18)$$

$$\vec{v}_{-\alpha'} = \frac{\vec{v}_\alpha + \vec{v}_\beta}{2} - \frac{|\vec{V}|}{2} \vec{n}_{\alpha'} \quad (2.19)$$

Отметим, что выбранная квадратура на сфере не совпадает с узлами расчётной сетки. Поэтому в процессе вычислений требуется интерполировать данные с узлов квадратуры на сфере на узлы расчётной сетки. Для интерполяции использовался метод, предложенный в работе [?]. Доля интеграла, приходящая на узел квадратуры на сфере \vec{v}_α , распределяется

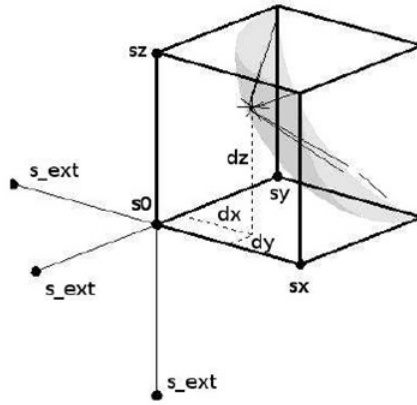


Рис. 2.3: Интерполяция в узлы сетки в скоростном пространстве

в ближайший узел и соседние узлы расчётной сетки (2.3) со следующими весами:

$$S_0 = 1 - \frac{d_x}{h_{vx}} - \frac{d_y}{h_{vy}} - \frac{d_z}{h_{vz}} - 6S_{ext}, \quad (2.20)$$

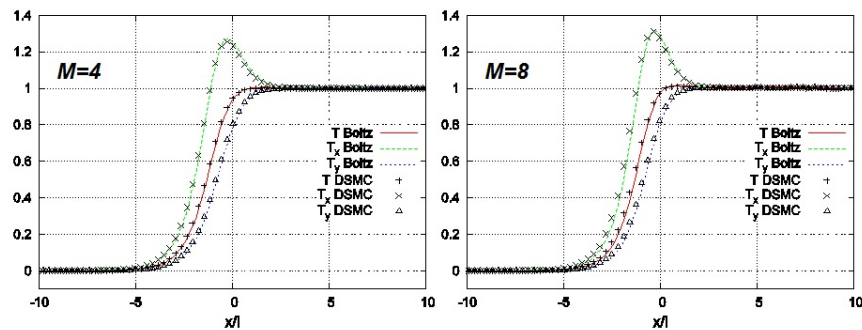
$$S_x = \frac{d_x}{h_{vx}} + S_{ext}, \quad (2.21)$$

$$S_y = \frac{d_y}{h_{vy}} + S_{ext}, \quad (2.22)$$

$$S_z = \frac{d_z}{h_{vz}} + S_{ext}, \quad (2.23)$$

$$S_{ext} = \frac{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2 - d_x h_{vx} - d_y h_{vy} - d_z h_{vz}}{2(h_{vx}^2 + h_{vy}^2 + h_{vz}^2)} \quad (2.24)$$

2.3 Результаты



Нормализованные профили продольной T_{xx} , поперечной T_{yy} и полной $(T_{xx}+T_{yy}+T_{zz})/3$ температуры.

Рис. 2.4: сравнение с DSMC

1. Проведена алгоритмическая оптимизация изложенного метода.
2. Оптимизированный алгоритм программно реализован на CUDA. Полученное ускорение по сравнению с изначальным параллельным алгоритмом составило 2,8 раз.
3. Проведена серия расчётов ударной волны для газа твёрдых шаров. Получено совпадение с расчётами методом ПСМ (Рис. 2.4).

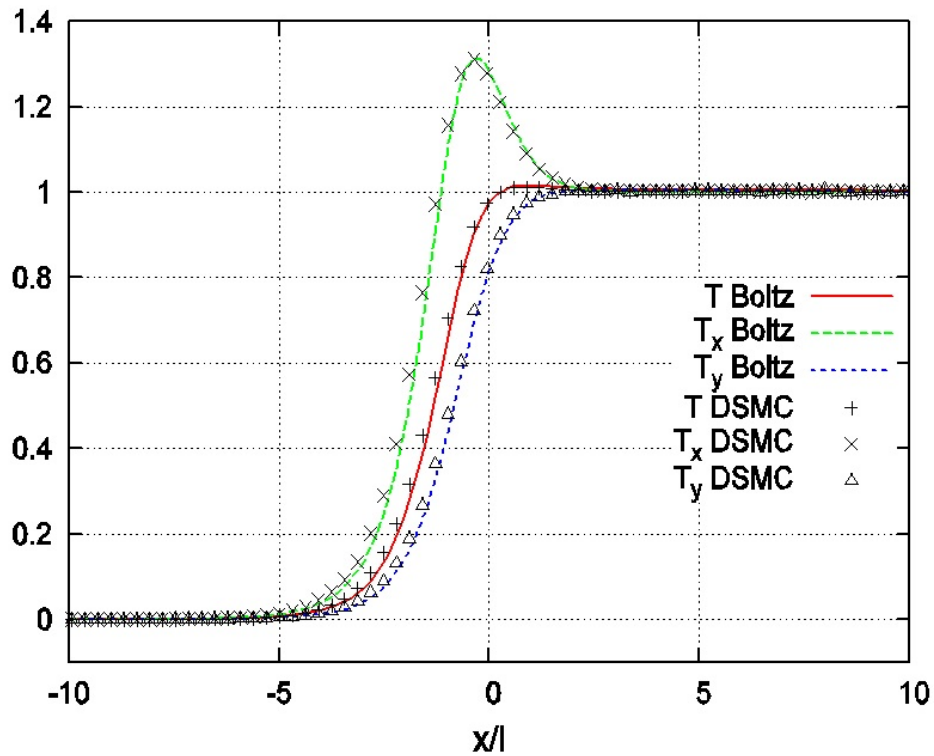


Рис. 2.5: сравнение с DSMC для $M_1 = 8$

4. Получено подтверждение существования локального максимума температуры за фронтом ударной волны для больших чисел Маха (Рис. 2.5).

3 Эффект от использования кластера

Кластер позволил за обозримое время проводить расчёты интеграла столкновений. До появления мощных вычислительных кластеров детерминированные численные методы решения уравнения Больцмана развивались очень медленно. И только в последние 5-10 лет данные методы стали бурно развиваться.

4 Перечень публикаций, содержащих результаты работы

- Malkov, E. A.; Poleshkin, S. O., Ivanov, M. S.: Discrete velocity scheme for solving the Boltzmann equation with the GPGPU, AIP Conference Proceedings. Nov2012, Vol. 1501 Issue 1, p318-326.
- Е.А. Малков, С.О. Полешкин и М.С. Иванов: Детерминированный метод численного решения уравнения Больцмана, Всероссийская конференция «Современные проблемы динамики разреженного газа», Новосибирск 26-30 июля 2013 г. (устный доклад).
- Malkov, E. A., Poleshkin, S. O., A. A. Kokhanchik, E.A. Bondar, Ivanov, M. S.: An Accurate Direct Numerical Simulation of the Shock Wave Structure, Shock Waves, 2014, presented.
- S. O. Poleshkin, E. A. Malkov: An Adaptive Scheme of the Collision Integral Calculation, 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, July 13-18, 2014, Xi'an, China, Abstract.

5 Впечатления от работы кластера

Хорошее. Выражаю благодарность. Вызвали возмущение случаи, когда какой-либо один пользователь занимал большую часть узлов. Пожелание — развиваться, модернизироваться, увеличивать количество узлов с GPU! Последнее для нашей работы особенно важно! **Не могли бы Вы создать на кластере группу для нашего коллектива — пользователей eamalkov и sopoleshkin?**

Часть результатов не опубликована!