

Российская академия наук (РАН)

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ГИДРОДИНАМИКИ ИМ. М.А. ЛАВРЕНТЬЕВА СИБИРСКОГО
ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИГиЛ СО РАН)

УДК 532.7+532.516.5+532.593+531.43+539.3

№ госрегистрации: 01201178125

Инв. №

УТВЕРЖДАЮ:

Директор ИГиЛ СО РАН
д-р физ.-мат. наук, проф.



_____ А.А. Васильев

« 30 » 03 2012 г.

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ


Разработка и развитие инновационных методов и алгоритмов моделирования,
основанных на применении решеточных методов и методов клеточных
автоматов, предназначенных для численного исследования мультифизических
систем

по теме:

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
ПОСТАВЛЕННЫХ ПЕРЕД НИР ЗАДАЧ
(промежуточный)

Шифр 2011-1.4-514-029-004

Руководитель работ,
д-р физ.-мат. наук:

_____ 
30.03.2012

А.Л. Куперштох

Новосибирск 2012


СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ


Руководитель работы,
вед. науч. сотр.  А.Л. Куперштох (введение, разделы 1-3, заключ.)
д-р физ.-мат. наук 30.03.2012

Ответственные исполнители:

Зав. лабораторией  А.П. Ершов (раздел 1)
д-р физ.-мат. наук 30.03.2012

Глав. науч. сотр.  В.В. Остапенко (раздел 1)
д-р физ.-мат. наук 30.03.2012

Глав. науч. сотр.  Л.А. Лукьянчиков (раздел 1)
д-р физ.-мат. наук 30.03.2012

Вед. науч. сотр.  Е.В. Шилько (разделы 1-3)
д-р физ.-мат. наук 30.03.2012


Ст. науч. сотр.  Д.А. Медведев (разделы 1-3)
канд. физ.-мат. наук 30.03.2012

Ст. науч. сотр.  Д.И. Карпов (разделы 1-3)
канд. физ.-мат. наук 30.03.2012

Ст. науч. сотр.  Э.Р. Прууэл (разделы 1-3)
канд. физ.-мат. наук 30.03.2012

Науч. сотр.  А.В. Димаки (разделы 1-3)
канд. физ.-мат. наук 30.03.2012

Науч. сотр.  Н.П. Сатонкина (раздел 1, нормоконтроль)
канд. физ.-мат. наук 30.03.2012

Науч. сотр.  А.О. Кашкаров (раздел 1)
30.03.2012

Студент  Т.А. Бондаренко (раздел 1)
30.03.2012

РЕФЕРАТ

Отчет о научно-исследовательской работе «Экспериментальные и теоретические исследования поставленных перед НИР задач» по этапу № 2 государственного контракта № 07.514.11.4106 от 26 октября 2011 г. содержит: 103 страницы, 21 рисунок, 2 таблицы, 31 использованный источник.

Ключевые слова: РЕШЕТОЧНЫЕ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА, ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КЛЕТОЧНЫЕ АВТОМАТЫ, ГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССОРЫ, УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ, ДЕФОРМАЦИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Объектом исследования НИР являются методы и алгоритмы моделирования, основанные на применении метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов, для численного исследования таких мультифизических систем, как многокомпонентная гидродинамика, тепломассоперенос, течения с фазовыми переходами жидкость-пар, происходящими согласно заданному уравнению состояния, механические деформации объектов.

Целями работ, проводящихся на втором этапе, являются выполнение аналитического обзора информационных источников по методу решеточных уравнений Больцмана, включая моделирование многокомпонентных и многофазных сред, по методу подвижных клеточных автоматов и их реализациям на современных графических процессорах; проведение патентных исследований и выбор направления исследований объекта НИР.

Метод решеточных уравнений Больцмана и метод подвижных клеточных автоматов представляют собой новый класс методов, использующих мезоскопический подход к описанию вещества, и основаны на дискретных моделях сплошной среды.

В ходе выполнения второго этапа работы получены следующие результаты:

1) Выполнена разработка теории математического моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики, тепломассопереноса, фазовых переходов жидкость-пар и механических деформаций.

2) Выбраны способы решения поставленных задач.

3) Разработан экспериментальный образец (ЭО) программных реализаций алгоритмов и методов, предложенных в рамках выполнения НИР первого этапа и

обеспечивающий распараллеливание расчетов на современных графических процессорах.

4) Разработана программа и методика экспериментальных исследований ЭО.

5) Проведены экспериментальные исследования ЭО.

6) Проведено сопоставление результатов моделирования с известными аналитическими и численными результатами.

7) Разработана программная документация на ЭО.

8) Проведены дополнительные патентные исследования объекта НИР.

9) Реализованы мероприятия по достижению программных индикаторов и показателей (привлечение молодежи, публикация статей, подача заявки на регистрацию РИД).

10) За счет внебюджетных средств были организованы современные рабочие места для исполнителей проекта, проведена сборка 3-х компьютеров с графическими устройствами фирмы NVIDIA для проведения параллельных вычислений на графических процессорах, в том числе станции с двумя графическими картами GTX-580, компьютеры на рабочих местах оснащены программным обеспечением, установлена точка доступа и запущена программа HTTP-сервера для поддержки проекта в сети Интернет.

Для метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов выбраны алгоритмы, допускающие распараллеливание на новейших высокопроизводительных графических процессорах, что позволит значительно увеличить скорость расчетов, а также в несколько раз сократить электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности. Для распараллеливания алгоритма на большое количество ядер графических процессоров фирмы NVIDIA выбрана технология программирования CUDA (Compute Unified Device Architecture).

Научные результаты работы (разработанные алгоритмы и методы моделирования, экспериментальный образец программных реализаций), полученные на втором этапе НИР, могут быть внедрены (использованы) в инженерную практику только после окончания НИР. Кроме того, результаты будут использованы на третьем этапе НИР при разработке Технических условий на ОКР.

На данном этапе исследований экономической эффективности результаты НИР иметь не могут. Вместе с тем, Ученый совет ИГиЛ СО РАН, на котором принимался отчет по второму этапу работы, отметил перспективность продолжения работ на третьем этапе.

Практическая ценность проведенных работ заключается в создании Экспериментального образца программы для моделирования мультифизических явлений на графических процессорах методами решеточных уравнений Больцмана (LBE) и подвижных клеточных автоматов (MCA), а также в выполнении дополнительного патентного исследования. ЭО работает как на компьютерах с операционной системой Windows, так и с операционной системой LINUX.

Дальнейшее развитие объекта исследований заключается:

1) В развитии Экспериментального образца программных реализаций алгоритмов и методов.

2) В использовании следующих версий графических процессоров “Kepler” и “Maxwell” вместо графических процессоров “Fermi”, существующих в настоящее время. Первые графические процессоры “Kepler” выпущены в конце марта 2012 г. и имеют производительность в 3 раза выше, но обладают меньшей памятью. Ожидается, что графические процессоры “Kepler” с памятью 4 Гигабайта появятся в России в третьем квартале 2012 г.

СОДЕРЖАНИЕ

РЕФЕРАТ	3
ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ	8
ВВЕДЕНИЕ	9
1 Разработка теории математического моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики, тепломассопереносов, фазовых переходов жидкость-пар и механических деформаций.....	14
1.1 Общая теория метода решеточных уравнений Больцмана.....	14
1.2 Моделирование многокомпонентной гидродинамики.....	16
1.3 Моделирование тепломассопереноса.....	17
1.4 Моделирование фазовых переходов жидкость-пар	23
1.5 Моделирование механических деформаций и разрушения	26
2 Выбор способов решения поставленных задач и разработка методов и алгоритмов моделирования, основанных на применении решеточных методов и методов клеточных автоматов	30
3 Разработка экспериментального образца программных реализаций метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов для параллельных расчетов на графических процессорах	33
3.1 Массивы с автоматическим распределением данных на несколько GPU	34
3.2 CUP препроцессор.....	35
3.3 Библиотека моделирования мультифизических процессов.....	37
3.4 Программа LaBSim-Flow.....	37
3.5 Описание алгоритма моделирования методом подвижных клеточных автоматов.....	41
4 Разработка программы и методики экспериментальных исследований экспериментального образца программных реализаций алгоритмов и методов.....	45
5 Проведение экспериментальных исследований экспериментального образца программных реализаций метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов. Сопоставление результатов моделирования с известными аналитическими и численными результатами	45
5.1 Простое течение.....	45

5.2	Многокомпонентная гидродинамика	48
5.3	Тепломассоперенос	50
5.4	Двухфазные системы жидкость–пар.....	52
5.5	Деформации и разрушение твердых тел.....	55
6	Доработка экспериментального образца с учетом результатов экспериментальных исследований.....	58
7	Разработка программной документации на экспериментальный образец программных реализаций метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов	58
8	Корректировка технической документации по результатам экспериментальных исследований.....	58
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	59
	СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	62
	ОТЧЕТ О ПАТЕНТНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ.....	65

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

Аббревиатура	Расшифровка
НИР	Научно исследовательские работы
ЭО	Экспериментальный образец программных реализаций методов и алгоритмов
РИД	Результаты интеллектуальной деятельности
CUDA	Компьютерная технология распараллеливания (Compute Unified Device Architecture)
ОКР	Опытно-конструкторские работы
СО РАН	Сибирское отделение Российской академии наук
ИГиЛ СО РАН	Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН
LBE	Решеточное уравнение Больцмана (Lattice Boltzmann Equation)
MCA	Подвижные клеточные автоматы (Movable Cellular Automata)
GPU	Графический процессор (Graphics Processing Unit)
CUP	Распараллеливание с использованием технологии CUDA (CUDA Parallel)
LaBSim-Flow	Название пакета программ “Моделирование течений с помощью решеточного уравнения Больцмана” (Lattice Boltzmann Simulations of Flows)
CPU	Центральный процессор (Central Processing Unit)
D3Q19	Трехмерный вариант метода LBE с 19 скоростями
BGK	Метод Бхатнагара-Гросса-Крука (Bhatnagar-Gross-Krook method)
CIP	Перенос с кубической интерполяцией (Cubic Interpolated Propagation)
ИФПМ СО РАН	Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
MNUPS	Миллионов узлов в секунду (Million Node Updates Per Second)

ВВЕДЕНИЕ

Часть 1 настоящего отчета содержит результаты работ, связанных с разработкой теории и основ решеточных методов и методов клеточных автоматов, созданием экспериментального образца (ЭО) программных реализаций, разработкой программы и методики экспериментальных исследований ЭО, разработкой программной документации на ЭО, проведением экспериментальных исследований ЭО. Работами данного направления непосредственно руководит доктор физико-математических наук А. Л. Куперштох.

1 Цель выполнения научно-исследовательских работ (НИР), решаемые задачи:

Целью НИР являются разработка и развитие уникальных алгоритмов и методов численного моделирования, основанных на применении новых методов: решеточных уравнений Больцмана и подвижных клеточных автоматов для решения таких сложных мультифизических задач, как моделирование многокомпонентной и многофазной гидродинамики, тепломассопереноса, а также процессов деформации и разрушения. Эти алгоритмы и методы реализованы на новейших высокопроизводительных графических процессорах, что позволило значительно увеличить скорость и точность моделирования, а также в несколько раз сократить электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности.

2 Разработка теории математического моделирования.

2.1 Метод решеточных уравнений Больцмана

Решеточные методы представляют собой новый класс методов, использующих мезоскопический подход к описанию вещества. Метод решеточных уравнений Больцмана LBE (Lattice Boltzmann Equation) представляет собой дискретную модель сплошной среды. При этом метод решеточных уравнений Больцмана более перспективен, чем обычные конечно-разностные методы, так как более адекватен природе вещества. В настоящее время метод LBE вполне может конкурировать с традиционными методами вычислительной гидродинамики, а в некоторых областях (многофазные и многокомпонентные течения) он имеет значительные преимущества.

Обоснованием метода LBE можно считать тот факт, что во втором порядке разложения Чепмена – Энскога из уравнений LBE получаются макроскопические уравнения гидродинамики, то есть известные уравнения неразрывности и Навье – Стокса.

Компьютерное моделирование фазовых переходов методом LBE представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз, в том числе и вновь возникающих в объеме вещества. Для описания уравнения состояния, допускающего фазовые переходы, вводятся силы, действующие на вещество в узле со стороны соседних узлов (симуляция притягивающей ветви потенциала межмолекулярного взаимодействия). Эти силы также обеспечивают поверхностное натяжение на границах раздела фаз.

При этом вместо разрыва плотности моделируется тонкий переходной слой жидкость–пар, в котором плотность изменяется плавно на размерах нескольких узлов решетки (аналогично методам сквозного счета ударных волн в газодинамике). При этом заметно упрощается логика компьютерных программ, так как жидкая и газообразная фазы описываются единообразно. Кроме того, отпадает необходимость в сложных граничных условиях на поверхностях раздела фаз.

Авторами проекта был предложен принципиально новый метод учета действия объемных сил в методе LBE. На основании этого предложена модель LBE с учетом фазовых переходов жидкость-пар согласно используемому уравнению состояния. Предложенные алгоритмы обеспечивают описание кривой сосуществования жидкость-пар с высокой точностью.

Таким образом, судя по участию в Международных конференциях, посвященных методу LBE, и по известным публикациям в рейтинговых журналах, наиболее продвинутое исследование по методу LBE в Российской Федерации выполняется в течение ряда лет только в Институте гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН коллективом исполнителей данного проекта.

Предложенные нами алгоритм учета действия объемных сил и реализация метода LBE с фазовыми переходами опережают мировой уровень, что признано зарубежными исследователями.

2.2 Метод подвижных клеточных автоматов

Сеточные методы, применяемые для описания деформаций материалов при интенсивных динамических воздействиях, отличаются высокой скоростью расчетов и хорошей точностью при расчетах небольших деформаций. Однако возможности применения сеточных методов весьма ограничены, если необходимо моделировать процессы в материалах, сопровождающиеся большими деформациями, в результате которых возможны образование и рост трещин, разрушение и перемешивание вещества.

Одним из современных методов численного моделирования динамических задач механики деформируемого твердого тела является разработанный в Институте физики прочности и материаловедения СО РАН (г. Томск) метод подвижных клеточных автоматов. В частности этот метод удобен в применении к задачам механики деформируемого твердого тела, в которых разрушение объекта сопровождается образованием большого количества границ и фрагментов.

Метод подвижных клеточных автоматов (movable cellular automata – MCA) возник как синтетический метод, объединяющий возможности метода молекулярной динамики и метода клеточных автоматов.

Объект моделирования представляется в виде ансамбля частиц (автоматов) конечного размера. Частицы могут перемещаться под действием соседей и внешних сил, как это было, например, в методе молекулярной динамики. При этом пара частиц может быть в двух состояниях – связанном и несвязанном. Связанное состояние означает, что частицы принадлежат одному фрагменту тела, несвязанное – что это части разных фрагментов тела или разные тела. Состояния связей могут переключаться, что определяется некоторой функцией перекрытия двух частиц (автоматов). Частицы (автоматы) испытывают деформации вследствие действия сил. Начальная конфигурация тела определяется системой парных связей, заданных между частицами вначале моделирования. Между частицами возникают помимо нормальных еще и касательные к поверхности контакта частиц силы, вызванные трением.

Пространственное перемещение и поворот частицы в методе MCA описывается уравнениями механики Ньютона-Эйлера.

При взаимодействии с соседями частица среды (автомат) меняет свой объем вследствие деформации. При этом считается, что автомат не имеет определенной

формы. При описании изменения объема вследствие деформаций форма автомата может быть выбрана с учетом симметрии системы (кубическая для кубической упаковки монокристаллов, ромбододекаэдр для гранцентрированной кубической и т.д.).

Центральная сила, обусловленная давлением на частицу i со стороны соседей, рассчитывается через средние деформации соседей с учетом их жесткости и площади соприкосновения с частицей i . Сила со стороны соседней частицы, вызывающая изменение формы частицы, рассчитывается через разность деформации, вызванной этой частицей, и средней деформацией со стороны всех соседей, с учетом модуля сдвига материала частицы i .

Вязкие силы между частицами рассчитываются в ньютоновском приближении. Вязкая сила пропорциональна относительным скоростям двух частиц и обратно пропорционально расстоянию между их центрами с коэффициентом пропорциональности равным вязкости материалов. При расчете тангенциальной составляющей сила вязкого трения определяется величиной скорости тангенциального смещения в точке контакта автомата i и автомата j .

Сдвиговая деформация вычисляется через скорость сдвиговой деформации, которая, в свою очередь, определяется разностью скорости вращения пары «частица i и соседняя с ней j » и скорости вращения самой частицы i . Сила сопротивления рассчитывается через скорости деформаций частиц i и j и соответствующих им модулей сдвига.

Особенный интерес к этому методу вызывается возможностью моделирования композиционных материалов, сыпучих сред. Еще одним преимуществом метода подвижных клеточных автоматов является возможность его использования совместно с численными методами механики сплошной среды.

Таким образом, метод МСА позволяет достаточно естественным образом описывать перемешивание масс, эффект проникновения, химические реакции, интенсивные деформации, фазовые превращения, накопление повреждений, фрагментацию и трещины, генерацию и развитие повреждений в твердых телах при интенсивных динамических нагрузках.

2.3 Разработка ЭО для параллельных вычислений на графических процессорах.

Графические процессоры на видеокартах – Graphics Processing Unit (GPU) имеют возможность параллельных вычислений на большом количестве ядер.

Алгоритм LBE включает в себя вычисления преимущественно в локальном узле, за исключением переноса частиц и вычисления градиента псевдопотенциала, что позволяет распараллелить вычисления на большое количество ядер современных графических процессоров.

Алгоритм метода МСА распараллеливается таким образом, что характеристики каждого элемента клеточного автомата на каждом шаге по времени обрабатываются одним ядром графического процессора.

На значительное ускорение вычислений влияют не только большое количество ядер GPU, но и ряд других факторов.

- Основной объем электронных компонентов внутри GPU спроектирован именно под устройства вычислений (до 80%), тогда как у центрального процессора CPU (Central Processing Unit) вычислительная часть – всего ~20%.
- Внутренняя память GPU (3 Гб для NVIDIA GTX-580-3Gb) работает на скорости 192 Гб/с, что на порядок выше, чем у оперативной памяти компьютера.
- Каждый мультипроцессор имеет большое количество быстрых внутренних регистров (32768 на блок).
- На GPU время переключения ядра между потоками происходит за один такт.

1 РАЗРАБОТКА ТЕОРИИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ, ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА, ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ЖИДКОСТЬ-ПАР И МЕХАНИЧЕСКИХ ДЕФОРМАЦИЙ

1.1 Общая теория метода решеточных уравнений Больцмана

В отличие от классических методов расчета течений жидкости путем решения уравнений Навье – Стокса метод решеточных уравнений Больцмана рассматривает течение как движение ансамбля псевдочастиц, имеющих некоторую функцию распределения по дискретным скоростям.

Основная идея, предложенная в [10], заключается в том, что в кинетическом уравнении Больцмана для описания гидро-газодинамики достаточно использовать дискретный конечный набор скоростей частиц \mathbf{c}_k . Это фактически означает, что непрерывная функция распределения $f(\xi)$ по микроскопическим скоростям ξ заменяется на систему δ -функций вида $\sum_k N_k \delta(\xi - \mathbf{c}_k)$. Кроме того, в методе LBE скорости \mathbf{c}_k выбираются таким образом, чтобы за шаг по времени Δt частицы перелетали в соседние узлы регулярной пространственной решетки, вектора которой удовлетворяют условию $\mathbf{e}_k = \mathbf{c}_k \Delta t$ [1,2]. Для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19 [11] возможный набор векторов скорости ($k = 0, 1, \dots, b; b = 18$) показан на рис. 1.

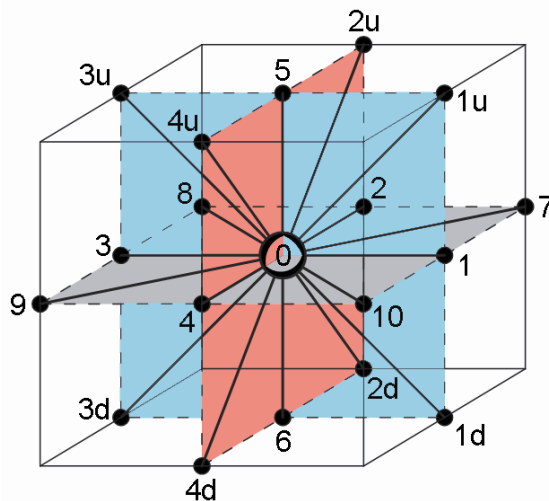


Рисунок 1 Возможные вектора скорости частиц в методе решеточных уравнений Больцмана для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19.

В методе LBE в качестве переменных используются коэффициенты перед δ -функциями, т.е. одночастичные функции распределения $N_k(\mathbf{x}, t)$ для всего конечного набора скоростей частиц \mathbf{c}_k .

Уравнение эволюции для функций распределения N_k имеет вид

$$N_k(\mathbf{x}, t) = N_k(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k \Delta t, t - \Delta t) + \Omega_k(N) + \Delta N_k, \quad (1)$$

где Ω_k – оператор столкновений, а ΔN_k – изменение функций распределения за счет действия объемных сил (внутренних и внешних). Обычно используется оператор столкновений в виде BGK (Bhatnagar – Gross – Krook [12]) приближения:

$$\Omega_k = (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) - \tilde{N}_k(\mathbf{x}, t)) / \tau, \quad (2)$$

которое представляет собой просто релаксацию к локальному равновесию. Безразмерное время релаксации τ определяет кинематическую вязкость $\nu = \theta(\tau - 1/2)\Delta t$. Изменяя в определенных пределах параметр $\tau > 1/2$, можно изменять вязкость жидкости. Здесь θ – нормированная кинетическая температура псевдочастиц. Для трехмерной изотермической модели LBE D3Q19 она равна $\theta = (h/\Delta t)^2 / 3$ [11], где h – шаг решетки.

Для реализации алгоритма вычислений нами использовано расщепление метода LBE по физическим процессам.

Уравнения переноса для функций распределения N_k вдоль характеристик (которые являются прямыми для уравнения Больцмана) на дискретной решетке имеют вид

$$\tilde{N}_k(\mathbf{x}, t) = N_k(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k \Delta t, t - \Delta t). \quad (3)$$

Гидродинамические переменные: плотность жидкости ρ и скорость \mathbf{u} в узле вычисляются в соответствии с формулами

$$\rho = \sum_{k=0}^b \tilde{N}_k, \quad (4)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^b \mathbf{c}_k \tilde{N}_k. \quad (5)$$

Для изотермических вариантов LBE-моделей используется разложение равновесных функций распределения Максвелла – Больцмана в ряд по скорости \mathbf{u} до второго порядка [13]:

$$N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \rho w_k \left(1 + \frac{\mathbf{c}_k \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2\theta} \right). \quad (6)$$

Векторы \mathbf{c}_k и коэффициенты w_k зависят от конкретной решетки. Для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19 допустимы три значения модуля скорости $|\mathbf{c}_k| = 0, h/\Delta t$ и $\sqrt{2}h/\Delta t$. Весовые коэффициенты равны $w_0 = 1/3$, $w_{1-6} = 1/18$ и $w_{7-18} = 1/36$ [11].

Кроме того, на каждом шаге по времени происходит изменение функций распределения за счет оператора столкновений и действия сил

$$N_k(\mathbf{x}, t) = \tilde{N}_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(\tilde{N}(\mathbf{x}, t)) + \Delta \tilde{N}_k, \quad (7)$$

Для учета действия объемных сил в методе LBE нами предложен метод точной разности [14-17]

$$\Delta \tilde{N}_k(\mathbf{x}, t) = N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}). \quad (8)$$

Изменение скорости $\Delta \mathbf{u}$ за шаг по времени определяется полной силой \mathbf{F} , действующей на вещество в узле, а именно

$$\mathbf{u} + \Delta \mathbf{u} = \mathbf{u} + \mathbf{F}\Delta t / \rho. \quad (9)$$

В случае действия объемных сил для вычисления физической скорости вещества \mathbf{u}^* следует использовать выражение, определенное на половине шага по времени [18]:

$$\rho \mathbf{u}^* = \sum_{k=1}^b \mathbf{c}_k \tilde{N}_k + \frac{1}{2} \mathbf{F}\Delta t$$

Обоснованием метода LBE можно считать тот факт, что во втором порядке разложения Чепмена – Энскога из уравнений LBE получаются макроскопические уравнения гидродинамики, то есть известные уравнения неразрывности и Навье – Стокса [3,16].

1.2 Моделирование многокомпонентной гидродинамики

Для правильного моделирования многокомпонентных течений необходимо корректно описать перенос компонентов.

При моделировании поведения многокомпонентных систем методом LBE каждый из компонентов s и σ описывается своим набором одночастичных функций распределения $N_k^s(\mathbf{x}, t)$ и $N_k^\sigma(\mathbf{x}, t)$ [19]. Уравнения эволюции для компонентов

имеют вид

$$N_k^s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k^s(\mathbf{x}, t) + \Omega_k^s + \Delta N_k^s. \quad (10)$$

$$N_k^\sigma(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k^\sigma(\mathbf{x}, t) + \Omega_k^\sigma + \Delta N_k^\sigma. \quad (11)$$

Здесь $\Delta N_k^s(\mathbf{x}, t)$ и $\Delta N_k^\sigma(\mathbf{x}, t)$ – изменения функций распределения под действием объемных сил. Операторы столкновений Ω_k^s и Ω_k^σ учитывают только столкновения частиц одного и того же сорта. Столкновения между частицами разных компонентов моделировались силами сопротивления

$$\mathbf{F}_d^s = -\mathbf{F}_d^\sigma = -\beta \rho^s \rho^\sigma (\mathbf{u}^s - \mathbf{u}^\sigma), \quad (12)$$

где $\rho^s = \sum_k N_k^s$ и $\rho^\sigma = \sum_k N_k^\sigma$ – плотности вещества компонентов смеси, а

$\mathbf{u}^s = \sum_k N_k^s \mathbf{c}_k / \rho^s$ и $\mathbf{u}^\sigma = \sum_k N_k^\sigma \mathbf{c}_k / \rho^\sigma$ – скорости компонентов в данном узле.

Ограниченная взаимная растворимость компонентов моделировалась силами отталкивания между частицами разного сорта, находящимися в соседних узлах расчетной решетки. Суммарные силы, действующие на вещество компонентов в узле за счет этих сил отталкивания, имеют вид

$$\mathbf{F}^s(\mathbf{x}) = \psi[\rho^s(\mathbf{x})] \sum_k B_k \psi[\rho^\sigma(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k)] \mathbf{e}_k, \quad (13)$$

$$\mathbf{F}^\sigma(\mathbf{x}) = \psi[\rho^\sigma(\mathbf{x})] \sum_k B_k \psi[\rho^s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k)] \mathbf{e}_k. \quad (14)$$

Все коэффициенты B_k выражаются через один параметр взаимодействия компонентов $B < 0$, определяющий степень малости взаимной растворимости компонент. Здесь $\psi(\rho)$ – возрастающая функция от плотности соответствующего компонента, вид которой определяет зависимость растворимости от давления.

1.3 Моделирование тепломассопереноса

1.3.1 Расчет теплопереноса в подвижной среде.

Для правильного моделирования многокомпонентных течений и течений с переменной температурой необходимо корректно описать перенос компонентов и внутренней энергии за счет конвекции и диффузии.

1.3.2 Перенос примеси

Уравнения переноса пассивной примеси (компонента, не влияющего непосредственно на скорость течения) выглядит следующим образом

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{U}) = \nabla \cdot (D\nabla c) \quad (15)$$

Здесь c – концентрация примеси, D – коэффициент диффузии, который может зависеть от пространственных переменных или (в случае нелинейной диффузии) от концентрации c , \mathbf{U} – скорость основного течения. Основные трудности при вычислениях вызывает конвективный член (второе слагаемое в левой части уравнения (1)).

1.3.2.1 Схема, использующая дополнительные функции распределения решеточного уравнения Больцмана

В рамках решеточного уравнения Больцмана возможно моделировать перенос пассивной примеси с помощью введения дополнительного набора функций распределения N_k так, что концентрация в данном узле равна $c(\mathbf{x}, t) = \sum_k N_k(\mathbf{x}, t)$.

Уравнение эволюции для N_k имеет вид

$$N_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k, t + \Delta t) = N_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k, \quad (16)$$

где \mathbf{e}_k – векторы решетки, Ω_k – оператор столкновений, который часто записывается в BGK-виде

$$\Omega_k = \frac{N_k^{eq}(c, \mathbf{U}) - N_k}{\tau_c}. \quad (17)$$

Равновесные функции распределения N_k^{eq} зависят от концентрации примеси c и скорости основного течения \mathbf{U} . В случае действия объемных сил (например, в многофазных течениях) эта скорость определяется как

$$\rho\mathbf{U} = \sum_k f_k \mathbf{c}_k + \mathbf{F}\Delta t / 2. \quad (18)$$

Здесь f_k – основные функции распределения метода LBE, $\mathbf{c}_k = \mathbf{e}_k / \Delta t$ – решеточные векторы скорости, \mathbf{F} – полная сила, действующая на вещество в узле. Время

релаксации τ_c задает коэффициент диффузии $D = \frac{\Delta x^2}{3\Delta t} \left(\tau_c - \frac{1}{2} \right)$. Достоинством схемы является сохранение изотропии, поскольку коэффициент диффузии не зависит от скорости течения. Основной недостаток – невозможность сделать коэффициент диффузии очень малым из-за возникновения в таких случаях численных осцилляций в областях больших градиентов концентрации.

Возможно также разделить полный шаг переноса на подшаги, описывающие конвективный перенос и диффузию (расщепление по физическим процессам). На каждом из подшагов решается соответствующее уравнение при помощи явной численной схемы. Использование неявных схем нецелесообразно, поскольку они слабо приспособлены для массивного распараллеливания на графических вычислительных устройствах. Кроме того, в моделируемых процессах коэффициент диффузии обычно достаточно мал, поэтому проблемы устойчивости не возникают.

Явная схема для подшага диффузии выглядит следующим образом

$$\frac{c_{i,j,k}^{n+1} - c_{i,j,k}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\Delta x} (j_{x,i+1/2,j,k} - j_{x,i-1/2,j,k} + j_{y,i,j+1/2,k} - j_{y,i,j-1/2,k} + j_{z,i,j,k+1/2} - j_{z,i,j,k-1/2}). \quad (19)$$

Здесь верхние индексы относятся к номеру шага по времени, нижние – к пространственным координатам узла. Диффузионные потоки можно определить разными способами. Простейший дает

$$j_{x,i+1/2,j,k} = \frac{D_{i+1,j,k}^n + D_{i,j,k}^n}{2\Delta x} (c_{i+1,j,k}^n - c_{i,j,k}^n), \quad (20)$$

прочие потоки записываются аналогично.

Для улучшения изотропности возможно использовать при вычислении потоков большее число пространственных точек.

$$\text{Схема устойчива при условии } \frac{\max(D)\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{6}.$$

Для подшага конвективного переноса возможно использовать различные разностные схемы.

1.3.2.2 Схема Лакса–Вендроффа

Схема выглядит следующим образом

$$\frac{c_{i,j,k}^{n+1} - c_{i,j,k}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\Delta x} (j_{x,i+1/2,j,k} - j_{x,i-1/2,j,k} + j_{y,i,j+1/2,k} - j_{y,i,j-1/2,k} + j_{z,i,j,k+1/2} - j_{z,i,j,k-1/2}). \quad (21)$$

Потоки на промежуточном временном слое $n + 1/2$ записываются как

$$j_{x,i+1/2,j,k}^{n+1/2} = c_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} U_{x,i+1/2,j,k}^{n+1/2}, \quad (22)$$

где значения переменных для промежуточного слоя

$$U_{x,i+1/2,j,k}^{n+1/2} = \frac{1}{2} (U_{x,i,j,k}^n + U_{x,i+1,j,k}^n) \\ c_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} = \frac{c_{i,j,k}^n + c_{i+1,j,k}^n}{2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (c_{i,j,k}^n U_{x,i,j,k}^n + c_{i+1,j,k}^n U_{x,i+1,j,k}^n) \quad (23)$$

Прочие потоки записываются аналогично.

Схема имеет второй порядок точности по пространству, следовательно, схемная диффузия отсутствует. Существует, однако, дисперсия, которая приводит к искажению формы движущегося профиля концентрации, а также к появлению численных осцилляций в областях больших градиентов.

Условие устойчивости схемы $\frac{\max(|U_x| + |U_y| + |U_z|)\Delta t}{\Delta x} < 1$.

1.3.2.3 Схема «Кабаре»

Описывается одномерный случай. Для расчета используются два набора переменных: потоковые $c_i^n = c(x_i, t_n)$ и консервативные $C_{i+1/2}^n = c(x_i + \Delta x/2, t_n)$.

Вначале можно положить $C_{i+1/2}^n = \frac{1}{2} (c_i^n + c_{i+1}^n)$.

Вначале консервативные переменные переносятся на промежуточный временной слой $n + 1/2$:

$$\frac{C_{i+1/2}^{n+1/2} - C_{i+1/2}^n}{\Delta t/2} = -U_{i+1/2}^n \frac{c_{i+1}^n - c_i^n}{\Delta x}. \quad (24)$$

Скорость в промежуточной точке можно определить как $U_{i+1/2}^n = \frac{1}{2} (U_i^n + U_{i+1}^n)$.

Далее потоковые переменные переносятся с помощью интерполяции (в случае $U > 0$)

$$\tilde{c}_{i+1}^{n+1} = 2C_{i+1/2}^{n+1/2} - c_i^n. \quad (25)$$

Завершающий шаг схемы состоит в коррекции потоковых переменных

$$c_{i+1}^{n+1} = \begin{cases} M, & \text{если } \tilde{c}_{i+1}^{n+1} > M \\ m, & \text{если } \tilde{c}_{i+1}^{n+1} < m \\ \tilde{c}_{i+1}^{n+1} & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (26)$$

Ограничивающие величины M и m вычисляются следующим образом

$$M = \max \left\{ c_{i+1}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} c_{i+1}^{n+1/2} (U_{i+3/2}^{n+1/2} - U_{i+1/2}^{n+1/2}), C_{i+1/2}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} C_{i+1/2}^{n+1/2} (U_{i+1}^{n+1/2} - U_i^{n+1/2}) \right\}, \quad (27)$$

$$m = \min \left\{ c_{i+1}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} c_{i+1}^{n+1/2} (U_{i+3/2}^{n+1/2} - U_{i+1/2}^{n+1/2}), C_{i+1/2}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} C_{i+1/2}^{n+1/2} (U_{i+1}^{n+1/2} - U_i^{n+1/2}) \right\}.$$

Схема имеет второй порядок точности по пространству. Недостатком схемы является искажение формы при переносе профиля концентрации.

$$\text{Условие устойчивости схемы } \frac{\max(|U_x| + |U_y| + |U_z|)\Delta t}{\Delta x} < 1.$$

1.3.2.4 Интерполяционная схема CIP (Cubic-interpolated propagation)

Схема основана на том, что при постоянной скорости течения U уравнение конвективного переноса имеет точное решение

$$c(\mathbf{x}, t) = c(\mathbf{x} - \mathbf{U}\Delta t, t - \Delta t).$$

В случае переменной скорости можно все равно записать приближенно

$$c_{i,j,k}^{n+1} = c^n(x_i - U_{x,i,j,k}^n \Delta t, y_j - U_{y,i,j,k}^n \Delta t, z_k - U_{z,i,j,k}^n \Delta t). \quad (28)$$

Значение концентрации в точке $(x_i - U_{x,i,j,k}^n \Delta t, y_j - U_{y,i,j,k}^n \Delta t, z_k - U_{z,i,j,k}^n \Delta t)$ находится с помощью трикубической интерполяции по соседним точкам.

В одномерном случае при $U_x < 0$ для интерполяции значения функции F в точке i используются значения функции и ее производной F_x по x в точках $i, i+1$.

$$F(x_i - U_x \Delta t) = F_i - \frac{U_x \Delta t}{\Delta x} \left(\Delta x F_{x,i} - \frac{U_x \Delta t}{\Delta x} \left(C_2 - \frac{U_x \Delta t}{\Delta x} C_3 \right) \right) \quad (29)$$

$$F_x(x_i - U_x \Delta t) = F_{x,i} - \frac{U_x \Delta t}{\Delta x} \left(2C_2 - 3 \frac{U_x \Delta t}{\Delta x} C_3 \right),$$

где коэффициенты вычисляются следующим образом

$$\begin{aligned} C_3 &= \Delta x(F_{x,i} + F_{x,i+1}) + 2(F_i - F_{i+1}) \\ C_2 &= 3(F_{i+1} - F_i) - 2\Delta x(F_{x,i} + F_{x,i+1}) \end{aligned} \quad (30)$$

При $U_x > 0$ для интерполяции используются значения функции и производной в точках $i, i-1$.

В трехмерном случае вначале выполняется интерполяция вдоль оси X , затем вдоль оси Y , далее вдоль оси Z (хотя порядок может быть произвольным). В первой интерполяции вычисляются значения функции, а также ее производных по y, z F_y, F_z и второй производной по y и z F_{yz} . Для этого необходимо задание в узлах значений всех первых и второй производных, а также третьей производной по x, y и z . Поэтому схема получается достаточно громоздкой и требующей большого количества вычислений и обращений к памяти. Подробно схема описана в статьях [20-21].

Схема имеет третий порядок точности по пространству. Достоинством схемы является отсутствие численной диффузии и дисперсии, приводящее к аккуратному переносу достаточно гладких профилей концентрации. В областях больших градиентов, однако, возникают численные осцилляции, что ограничивает возможности применения схемы. Условие устойчивости схемы $\frac{\max(U_x, U_y, U_z)\Delta t}{\Delta x} < 1$.

1.3.3 Перенос тепла

Уравнение для переноса тепла выглядит следующим образом

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (e\mathbf{U}) = \nabla \cdot (k\nabla T) + \frac{P}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\eta}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} \right)^2. \quad (31)$$

Здесь e – внутренняя энергия вещества, которая связана с его температурой. В простейшем случае $e = \rho C T$, где ρ – плотность вещества, а C – его теплоемкость. Первое слагаемое в правой части соответствует теплопроводности (коэффициент теплопроводности k), второе – работе сил давления и третье – нагреванию за счет вязкого трения (коэффициент вязкости η).

Нагревание за счет трения обычно мало, и им можно пренебречь. В случае небольших изменений плотности (в однофазных течениях) возможно также пренебречь работой сил давления.

Для численного решения уравнения (31) можно использовать описанные выше схемы, однако при переменной плотности необходимо минимизировать паразитную диффузию внутренней энергии, поскольку она приводит к возникновению нефизической разности температур в соседних областях разной плотности. В случае небольших изменений плотности этот эффект также выражен слабо.

В процессе создания программного продукта были протестированы все описанные выше схемы. По результатам тестирования для расчета тепломассопереноса была выбрана и реализована схема, использующая дополнительные функции распределения решеточного уравнения Больцмана (схема 1), поскольку только она обеспечивает полную изотропность при переносе. Кроме того, одновременно вычисляются конвективный перенос и диффузия, что уменьшает число необходимых вычислений.

1.4 Моделирование фазовых переходов жидкость-пар

Компьютерное моделирование фазовых переходов методом LBE представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз, в том числе и вновь возникающих в объеме вещества [19,22-23]. В этом случае вместо разрыва плотности моделируется тонкий переходной слой жидкость-пар, в котором плотность изменяется плавно на размерах нескольких узлов решетки (аналогично методам сквозного счета ударных волн в газодинамике). При этом заметно упрощается логика компьютерных программ, так как жидкая и газообразная фазы описываются единообразно. Кроме того, отпадает необходимость в сложных граничных условиях на поверхностях раздела фаз.

Для этого в [19] было предложено ввести силы притяжения, действующие на вещество в узле со стороны соседних узлов. При этом силы между узлами обеспечивают наличие поверхностного натяжения на границе раздела фаз жидкость-пар.

В рамках изотермической модели в [22] было предложено вместо сил притяжения между узлами использовать значение полной силы F , действующей на

вещество в каждом узле. Для этого было введено понятие псевдопотенциала $U(\rho) = P(\rho) - \rho\theta$. Сила, действующая на вещество в узле, выражается через градиент псевдопотенциала

$$\mathbf{F} = -\nabla U, \quad (32)$$

В работе [23] для описания уравнения состояния произвольного вида $P(\rho, T)$ псевдопотенциал был записан в форме

$$U = P(\rho, T) - \rho\theta. \quad (33)$$

В [24-26] нами предложено для модели [23] ввести новую функцию

$$\Phi = \sqrt{-U}. \quad (34)$$

Тогда выражение для силы (32) можно переписать в эквивалентном виде

$$\mathbf{F} = A\nabla(\Phi^2) + 2(1 - A)\Phi\nabla\Phi, \quad (35)$$

где A – свободный параметр.

Конечно-разностная формула для уравнения (35), обеспечивающая достаточную изотропность для трехмерной модели D3Q19 [24-26] и записанная в векторной форме, имеет вид

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\alpha h} \left[(1 - 2A)\Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k + A \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k \right]. \quad (36)$$

Здесь $G_k > 0$ – коэффициенты, которые различны для основных и диагональных направлений решетки. Коэффициенты $G_{1-6} = G_0$ соответствуют основным направлениям решетки. Для трехмерной модели D3Q19 значения коэффициентов для диагональных направлений G_k , обеспечивающие изотропность пространства, равны $G_0/2$, а $\alpha = 3$.

В большинстве расчетов использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, которое в приведенных переменных $\tilde{P} = P/P_{кр}$, $\tilde{\rho} = \rho/\rho_{кр}$ и $\tilde{T} = T/T_{кр}$ имеет вид

$$\tilde{P} = \frac{8\tilde{\rho}\tilde{T}}{3 - \tilde{\rho}} - 3\tilde{\rho}^2. \quad (37)$$

Здесь $P_{кр}$, $\rho_{кр}$ и $T_{кр}$ – значения давления, плотности и температуры в критической точке.

Аппроксимация (36) значительно улучшает результаты при LBE моделировании. При $A = -0.152$ отклонение кривой сосуществования фаз для

уравнения состояния Ван-дер-Ваальса от теоретической меньше, чем 0,2% в диапазоне температур от критической до $\tilde{T} = 0.4$ [24].

Хорошая изотропность аппроксимации (13) обеспечивает правильные значения поверхностного натяжения на границе раздела фаз и круглую форму капель жидкости в газе и паровых пузырей в жидкости в стационарном случае. При этом выполняется закон Лапласа для скачка давления на кривой поверхности

$$\Delta P = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (38)$$

где R_1 и R_2 – главные радиусы кривизны поверхности. Величина поверхностного натяжения σ зависит от уравнения состояния флюида [27], при этом σ уменьшается с увеличением температуры и обращается в нуль в критической точке.

В [15,24,26] было показано, что при моделировании фазовых переходов в методе ЛВЕ для учета действия сил следует использовать метод точной разности (32). Результаты, полученные другими известными методами учета действия сил [19,28] (метод модификации оператора столкновений и метод явной производной), гораздо хуже и, более того, зависят от времени релаксации τ , что противоречит физическому смыслу. В комбинированном методе [29] результаты не зависят от времени релаксации τ , но приводят к сильно сдвинутым значениям плотности пара на кривой сосуществования [15,24,26].

1.4.1 Численная устойчивость алгоритма

В работе [17] было показано, что критерием устойчивости жидкой фазы является условие $\tilde{c} \leq \tilde{c}_{кр} = \sqrt{1 + \tilde{\theta}}$, где безразмерная скорость звука $\tilde{c} = c_s \Delta t / h$ (гидродинамическое число Куранта, возникающее для явных конечно-разностных схем уравнений газодинамики). Здесь $c_s = \sqrt{(\partial P / \partial \rho)_T}$ – скорость звука для изотермических вариантов метода ЛВЕ, определяемая уравнением состояния вещества. При $\tilde{\theta} = 1/3$ критическое значение равно $\tilde{c}_{кр} = 1.1547$. Для уравнения состояния в безразмерной форме число Куранта записывается в виде $\tilde{c} = \sqrt{k(\partial \tilde{P} / \partial \tilde{\rho})_T}$, где безразмерный параметр $k = P_{кр} (\Delta t / h)^2 / \rho_{кр}$ определяется характеристиками вещества и величиной шагов по времени и координате. Как

обычно, для устойчивости численных расчетов необходимо относительно малое отношение $\Delta t / h$ [17].

1.4.2 Метод расщепления алгоритма LBE

Алгоритм метода LBE с фазовыми переходами состоит из нескольких шагов, выполняемых последовательно (метод Яненко – расщепление по физическим процессам):

1. Перенос значений функций распределения вдоль характеристик (1).
2. Вычисление новых значений плотности ρ по (4) и значений функции Φ с использованием (33), (34) и уравнение состояния, например, (37).
3. Вычисление полной силы взаимодействия (36), действующей на узел (то есть, значения градиента псевдопотенциала).
4. Вычисление значений скорости в узле до и после действия сил (5) и (9), соответственно. Вычисление соответствующих равновесных функций распределения (6).
5. Изменение функций распределения в узлах (7) за счет действия оператора столкновений (2) и за счет действия сил с использованием метода точной разности (8).

Очевидно, что алгоритм LBE включает в себя вычисления преимущественно в локальном узле расчетной сетки, за исключением переноса частиц и расчета сил взаимодействия между узлами, что позволяет его эффективно распараллелить на большое количество ядер GPU.

1.5 Моделирование механических деформаций и разрушения

Применение сеточных методов ограничено моделированием процессов в материалах, сопровождающихся малыми деформациями. Для описания образования и роста трещин, разрушения и перемешивания вещества использован метод подвижных клеточных автоматов (MCA – movable cellular automata), разработанный в ИФПМ СО РАН (г. Томск). Теоретические основы метода подробно описаны в отчете по первому этапу настоящего Госконтракта.

Автомат имеет радиус R в недеформированном состоянии, массу m , момент инерции J . Поступательное движение описывается вторым законом Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 \vec{R}_i}{dt^2} = \vec{F}_i^{\Omega} + \sum_j \vec{F}_{ij}, \quad (39)$$

где \vec{F}_i^{Ω} – суммарная объемная сила, действующая на i автомат, \vec{F}_{ij} – сила, действующая на i автомат со стороны j автомата в месте их контакта.

Для вращательного движения клеточного автомата.

$$J \frac{d^2 \vec{\theta}_i}{dt^2} = \sum_j q_{ij} [\vec{n}_{ij} \times \vec{F}_{ij}]. \quad (40)$$

Здесь $\vec{\theta}_i$ – вектор угла поворота автомата, q_{ij} – расстояние от центра i автомата до точки его контакта с j автоматом, \vec{n}_{ij} – единичный радиус-вектор от центра i автомата к центру j автомата.

Пара автоматов может находиться в двух состояниях.

- 1) В связанном состоянии между частицами действуют парные и объемные силы.
- 2) Несвязанное состояние соседних автоматов означает разрыв сплошности среды в этом месте.

В реализованной модели используется простейший случай взаимодействия частиц по закону Гука.

$$f = \begin{cases} -k(r - r_0), & \text{при } r \leq r_{\max}; \\ 0, & \text{при } r > r_{\max}. \end{cases} \quad (41)$$

где r – текущее расстояние между центрами автоматов, $r_0 = 2R$ – расстояние между автоматами в недеформированном состоянии, k – коэффициент упругой связи между автоматами.

Объемная сила необходима для учета поперечных деформаций при продольных растяжениях/сжатиях. Для ее расчета используется следующий алгоритм. Для каждой частицы ансамбля вычисляется средняя деформация:

$$\bar{\xi}_i = \frac{1}{2 \cdot M \cdot r_0} \sum_{j=1}^M (r_j - r_0). \quad (42)$$

Здесь M – количество соседей, связанных с данной частицей. Множитель 2 в знаменателе равен размерности пространства.

$$\vec{F}_i^{\Omega} = \sum_{i=1}^M P_j S_{ij} \vec{n}_{ij}, \quad \text{где } P_j = -\chi \xi_j, \quad (43)$$

где χ – коэффициент объемной упругой деформации, S_{ij} – площадь контакта автоматов.

К парным силам относятся вязкие силы и силы, возникающие в результате деформации сдвига. Касательные к поверхности автоматов вязкие силы пропорциональны разности скоростей поверхностей автоматов, контактирующих между собой. Угловая скорость вращения пары автоматов как целого:

$$\vec{\omega}_{ij} = \frac{[\vec{r}_{ij} \times (\vec{v}_j - \vec{v}_i)]}{r_{ij}^2}, \quad (44)$$

где \vec{r}_{ij} – вектор от центра i -го автомата к центру j -го автомата. Тогда сила вязкого трения рассчитывается по формуле:

$$\vec{F}_{ij} = -\eta \frac{[\vec{V}_{ij} \times \vec{r}_{ij}]}{r_{ij}^2}, \quad (45)$$

где η – вязкость материала, $\vec{V}_{ij} = (\vec{\omega}_{ij} r - \vec{\omega}_i q_{ij} - \vec{\omega}_j q_{ji})$. Здесь $\vec{\omega}_i$ – угловая скорость i -ой частицы, $\vec{\omega}_j$ – угловая скорость j -ой частицы.

При взаимном движении автоматов, находящихся в контакте, возникают сдвиговые деформации. Возникающая парная сила в случае малых деформаций рассчитывается согласно формуле:

$$\vec{F}_{ij}^S = g[\vec{n}_{ij} \times \vec{\gamma}_{ij}], \quad (46)$$

где $\vec{\gamma}_{ij}$ – угол сдвига, который рассчитывается через скорости вращения автоматов:

$$\vec{\gamma}_{ij} = \int_0^{t_{ij}} (\vec{\omega}_i + \vec{\omega}_j - 2\vec{\omega}_{ij}) dt, \quad (47)$$

где t_{ij} – время с момента установления текущего контакта между автоматами.

Момент сил, действующих на частицу i , возникающий под действием сил вязкого трения и сдвиговых деформаций между i -ой и j -ой частицами, равен

$$\vec{M}_{ij}^v = \frac{1}{2} [\vec{r}_{ij} \times (\vec{F}_{ij}^v + \vec{F}_{ij}^s)]. \quad (48)$$

Момент силы, возникающий вследствие деформации изгиба, рассчитывался по формуле:

$$\vec{M}_{ij}^v = [\vec{r}_{ij} \times \vec{F}_{ij}^v], \quad (49)$$

где $\vec{F}_{ij}^b = g[\vec{n}_{ij} \times \vec{\varphi}_{ij}]$, угол $\vec{\varphi}_{ij} = \frac{1}{2} \int_0^{t_{ij}} (\vec{\omega}_i - \vec{\omega}_j) dt$.

Выводы по главе 1

Разработана теория математического моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики, тепломассопереноса, фазовых переходов жидкость-пар и механических деформаций на основе методов решеточного уравнения Больцмана и подвижных клеточных автоматов. Исследованы изотропность, точность аппроксимации и устойчивость различных схем, выработаны рекомендации по их использованию для решения поставленных задач. Показано, что рассмотренные методы допускают эффективное распараллеливание на вычислительные ядра GPU.

2 ВЫБОР СПОСОБОВ РЕШЕНИЯ ПОСТАВЛЕННЫХ ЗАДАЧ И РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ И АЛГОРИТМОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ, ОСНОВАННЫХ НА ПРИМЕНЕНИИ РЕШЕТОЧНЫХ МЕТОДОВ И МЕТОДОВ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

Согласно пп. 1.1 – 1.4 метод решеточных уравнений Больцмана более перспективен, чем обычные конечно-разностные методы, так как более адекватен природе вещества. В настоящее время метод LBE вполне может конкурировать с традиционными методами вычислительной гидродинамики, а в некоторых областях (многофазные и многокомпонентные течения) он имеет значительные преимущества.

Для трехмерных задач выбран вариант метода LBE с девятнадцатью векторами скорости – D3Q19.

Алгоритм LBE включает в себя вычисления преимущественно в локальном узле расчетной сетки (расчет столкновений, плотности, локальной скорости течения), за исключением расчетов переноса частиц и сил взаимодействия между узлами. Это позволяет эффективно распараллелить его на большое количество ядер GPU.

1) Выбор методов описания многокомпонентных течений (п. 1.2) диктуется необходимостью моделирования как практически несмешиваемых компонентов, так и учета их частичной взаимной растворимости LBE-компонент.

2) По результатам тестирования для расчета тепломассопереноса была выбрана и реализована схема, использующая дополнительные функции распределения решеточного уравнения Больцмана (п. 1.3.2.1 и п. 1.3.3, схема 1), поскольку только она обеспечивает полную изотропность при переносе, позволяет одновременно вычислить конвективный перенос и диффузию, что уменьшает число необходимых вычислений.

3) Выбор описанных в п. 1.5 методов подвижных клеточных автоматов продиктован с одной стороны их эффективностью при описании деформаций при интенсивных динамических нагрузках: накопление повреждений, фрагментация и трещины, возникновение и развитие разрушений твердых тел, закрытие трещин и дефектов под действием нагрузки. С другой стороны, их легко реализовать в виде алгоритмов и достаточно просто адаптировать для параллельных вычислений.

4) Для описания течений с фазовыми переходами при моделировании фазовых переходов в методе LBE для учета действия сил выбран метод точной разности (8), наиболее обоснованный теоретически и обеспечивающий наибольшую точность среди всех известных методов учета действия силы (п.1.4). Для аппроксимации силы на расчетной сетке выбрана формула (36), поскольку она наилучшим образом учитывает изотропность пространства и обеспечивает наиболее высокую точность расчетов газодинамических течений с фазовыми переходами «жидкость-пар» (п. 1.4).

В процессе создания ЭО описанные выше схемы были реализованы в виде компьютерных программ на языке программирования C++ с применением технологии NVIDIA CUDA (Compute Unified Device Architecture). В качестве языка программирования был выбран язык C++, который обеспечивает широкий диапазон средств реализации вычислительных алгоритмов (классы, шаблоны, стандартные библиотеки шаблонов в свободном доступе и т.д.).

Графические процессоры на видеокартах имеют возможность параллельных вычислений на большом количестве ядер. Впервые GPU были использованы для моделирования методом LBE в работе [5]. Однако до настоящего времени параллельные вычисления на одной или нескольких видеокартах применялись только для простых вариантов метода LBE без фазовых переходов [5-9].

На значительное ускорение вычислений влияют не только большое количество ядер GPU, но и ряд других факторов:

- Основной объем электронных компонентов внутри GPU спроектирован именно под устройства вычислений (до 80%), тогда как у центрального процессора CPU для вычислительной части используется всего ~ 20%.
- Внутренняя память GPU (3 Гб для GTX-580) работает на скорости 192 Гб/с, что на порядок выше, чем у оперативной памяти компьютера.
- Каждый мультипроцессор имеет большое количество быстрых внутренних регистров (32768 на блок).
- На GPU время переключения ядра между потоками происходит за один такт.

Для распараллеливания алгоритма на большое количество ядер современных графических процессоров использовалась технология программирования CUDA [30]. На сегодняшний день продажи графических процессоров, поддерживающих

CUDA, достигли 128 миллионов. Технология используется для создания программного обеспечения в различных областях: обработка видео, астрофизика, вычислительная биология и химия, моделирование динамики жидкостей, электромагнитных взаимодействий, восстановление изображений, полученных путем компьютерной томографии, сейсмический анализ, трассировку луча и многих других. Одним из самых перспективных направлений развития инженерных физических расчетов является использование кластеров на базе GPU (http://www.nvidia.ru/object/io_1241767854048.html). Таким образом, выбор технологии CUDA для создания экспериментального образца является обоснованным и оправданным.

Выводы по главе 2

Таким образом, выбор методов моделирования мультифизических задач, заявленных в настоящем проекте, является обоснованным. Реализованные алгоритмы распараллеливания расчетов обеспечивают радикальное увеличение скорости и точности моделирования, а также в несколько раз сокращают электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности (менее 1 Ватта на Гигафлопс).

3 РАЗРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОБРАЗЦА ПРОГРАММНЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ МЕТОДА РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА И МЕТОДА ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ РАСЧЕТОВ НА ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРАХ

Для реализации задач проекта был разработан пакет программ и библиотек программирования, реализующих параллельную обработку данных на нескольких GPU на одном компьютере. Для распараллеливания использовались только технологии CUDA, это позволило снять специальные требования на предустановленное программное обеспечение и запускать программу на обычном персональном компьютере.

Разработанный пакет состоит из нескольких уровней. Самый верхний – это набор готовых программ с графическим интерфейсом, позволяющий проводить расчеты не программируя. Программы позволяют пользователю описывать необходимую геометрию расчетной области, задавать начальные условия, проводить расчеты с визуализацией текущего состояния и сохранять полученные результаты в файлы ряда форматов для последующего анализа.

При запуске программа самостоятельно определяет имеющиеся на компьютере GPU, и исполнение всех тяжелых вычислительных алгоритмов происходит параллельно на всех найденных или специально указанных GPU.

Вторым уровнем является библиотека на языке программирования C++ содержащая средства для разработки программ численного моделирования методами LBE и подвижных клеточных автоматов. В библиотеке реализован ряд алгоритмов с автоматическим параллельным исполнением на нескольких GPU. Ее удобно использовать для проведения специализированных расчетов, нереализуемых средствами готовых программ.

Третий уровень состоит из препроцессора CUP (CUDA parallel) генерирующего функции исполняющиеся параллельно. Только на этом уровне используются средства CUDA и особенности разработки алгоритмов параллельного исполнения.

Самым последним уровнем являются 3d массивы данных с автоматическим распределением и обработкой данных на нескольких GPU. Они являются основным

средством используемым сопроцессором для генерации параллельно исполняющихся функций, но могут и использоваться и отдельно при написании параллельного алгоритма программистом.

3.1 Массивы с автоматическим распределением данных на несколько GPU

Библиотека позволяет создавать 3d массивы с автоматическим распределением данных на нескольких графических устройствах (device) одного узла (host). Для этого используются два специализированных класса: `d_Array3d_base` – часть данных (слой по оси z) общего массива хранящаяся в памяти одного устройства; `d_Array3d` – набор слоев по оси z формирующих весь набор данных (рис. 3.1).

Обычно количество GPU на одном компьютере даже на узлах специализированных кластеров не превышает трех. Поэтому, такое простое по реализации решение является достаточно разумным.

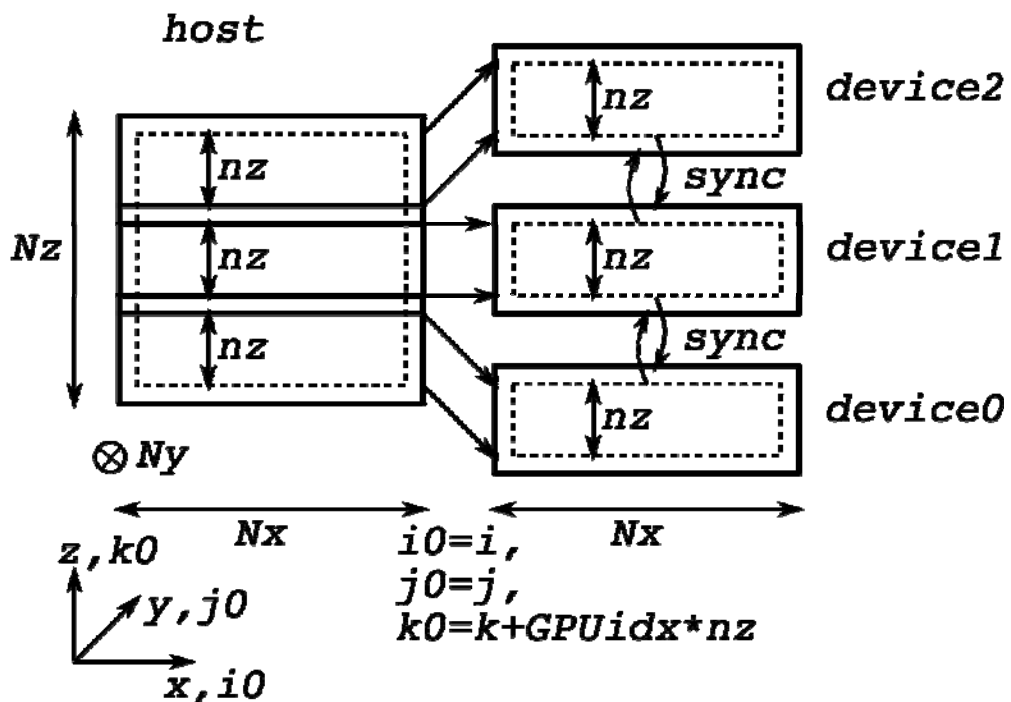


Рис. 3.1 Схема распределения массива данных (3d, 2d) на нескольких GPU.

Класс `d_Array3d_base` непосредственно содержит блок данных в форме параллелепипеда с полным количеством узлов по осям x, y и часть данных по оси z . Это самый низкий уровень иерархии представления данных, создается автоматически, предназначен для непосредственного производства действия над данными при работе параллельных алгоритмов.

Класс `d_Array3d` предоставляет пользователю удобный интерфейс, отвечающий

за весь набор данных распределяемых на нескольких GPU. Создается пользователем с необходимыми размерами реальной полной расчетной области. При работе алгоритмов автоматически параллельно запускает одинаковые функции обработки для всех частей находящихся на разных устройствах.

Для доступа к *i*-ой части слоя данных хранящейся на одном GPU через общий массив *a* используется метод `split(i, a)`, возвращающий `d_Array3d_base`.

Приведем небольшой пример параллельного алгоритма заполнения ячеек массива.

```
int gpu_array[2]={0,1}; // массив с номерами устройств GPU (device)
MP_Parallel MP_parallel(gpu_array, 2);

__global__ void f_parallel(d_Array3d_base<double> a){
    const size_t i=blockIdx.x*blockDim.x+threadIdx.x;
    const size_t j=blockIdx.y*blockDim.y+threadIdx.y;
    const size_t k=blockIdx.z*blockDim.z+threadIdx.z;
    const size_t ind=k*a.Nx*a.Ny+j*a.Nx+i;
    a[ind]=1.0;
}

int main(){
    //Массив вещественных с распределением памяти на нескольких GPU
    d_Array3d<double> a(256, 256, 256); // Nx, Ny, Nz

    dim3 threads(MP_parallel.Nx, MP_parallel.Ny, MP_parallel.Nz);
    dim3 grid(a.Nx/threads.x, a.Ny/threads.y, ((a.Nz-2)/MP_parallel.GPU_pool.size() +2)
/threads.z);
    cudaStream_t s[4]; // больше GPU/host не бывает :)
    for(size_t i=0; i<MP_parallel.GPU_pool.size(); i++){
        cudaSetDevice(MP_parallel.GPU_pool[i]);
        cudaStreamCreate(&s[i]);
        f_parallel<<<grid, threads, 0, s[i]>>>(split(i, a));
    }
    for(size_t i=0; i<MP_parallel.GPU_pool.size(); i++){
        cudaSetDevice(MP_parallel.GPU_pool[i]);
        cudaStreamDestroy(s[i]);
    }
    sync(a); // синхронизовать границы блоков
}
```

3.2 CUP препроцессор

Использование “умных” массивов освобождает от ручного распределения памяти, но, реализация параллельного алгоритма требует написание большого

количества рутинного кода с объявлением функций и последующим их вызовом в нужном контексте.

CUP – препроцессор генерирует код объявления функции и код параллельного вызова.

- ***CUP INSERT prefix*** – место вставки объявлений функций. *prefix* – префикс в именах создаваемых функций.
- ***CUP FORALL_3D var1 expr1 var2 expr2 ... # code #*** – параллельный цикл по всем элементам массива *expr1*.
- ***CUP FORALL_3D_IN var1 expr1 var2 expr2 ... # code #*** – параллельный цикл по всем внутренним элементам массива *expr1*.
- ***CUP FORALL_3D_IJK var1 expr1 var2 expr2 ... # code #*** – параллельный цикл по всем элементам массива *expr1*. Дополнительные доступные переменные: *i*, *j*, *k* -- индексы ячейки по осям *x*, *y*, *z* соответственно.
- ***CUP FORALL_3DYZ var1 expr1 var2 expr2 ... # code #*** – параллельный цикл по ячейкам плоскости $i=0$ ($x = 0$).
- ***CUP FORALL_3DXZ var1 expr1 var2 expr2 ... # code #*** – параллельный цикл по ячейкам плоскости $j=0$ ($y = 0$).
- ***CUP FORALL_3DXY var1 expr1 var2 expr2 ... # code #*** – параллельный цикл по ячейкам плоскости $k=0$ ($z = 0$).

Все функции исполняют код *code*, внутри генерируемых функций доступны локальные переменные: *var1*, *var2*, ... , *ind* – индекс, ячейки массива, *gpuIdx* – номер обрабатываемого слоя по оси *z*.

Небольшой пример параллельного алгоритма работающего на нескольких GPU с использованием препроцессора CUP.

```
// массив с номерами устройств GPU (device)
int gpu_array[2]={0,1};
MP_Parallel MP_parallel(gpu_array, 2);

// Обрабатывается препроцессором.
// В этом месте появятся определения функций
CUP INSERT cup_test

int main(){
    //Массив вещественных с распределением памяти на нескольких GPU
    d_Array3d<double> a(256, 256, 256); // Nx, Ny, Nz
```

```

CUP FORALL_3D a a #
    a[ind]=1.0;
#
sync(a);
}

```

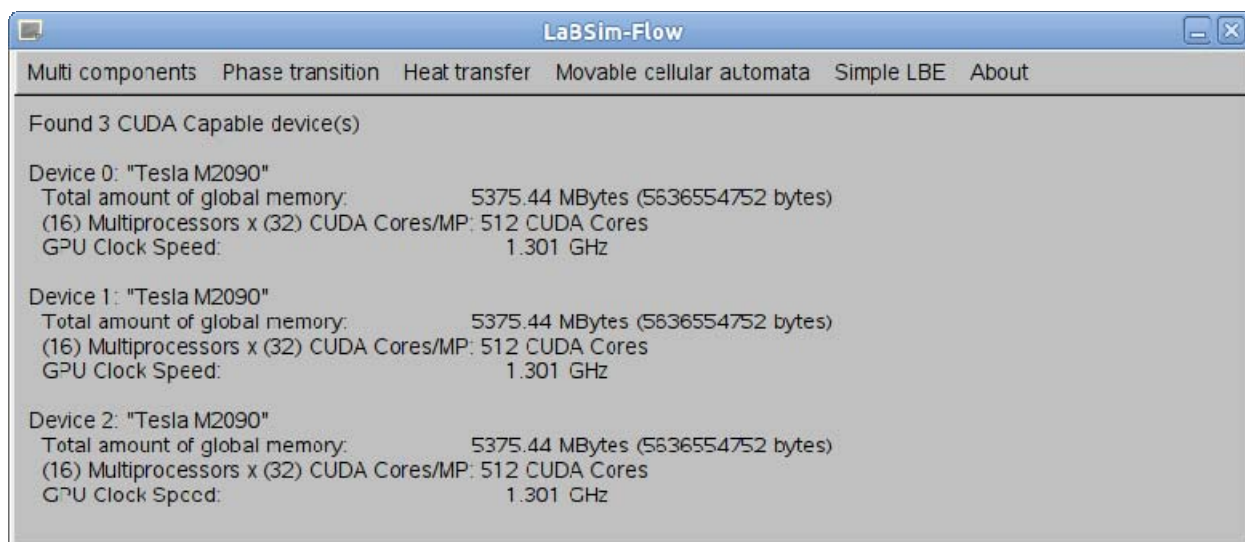
3.3 Библиотека моделирования мультифизических процессов

- 1) Простое LBE
- 2) Многокомпонентные течения
- 3) Течение с теплопереносом
- 4) LBE с внешними силами и фазовыми переходами
- 5) Подвижные клеточные автоматы

Описания геометрии расчетной области и начальных условий

3.4 Программа LaBSim-Flow

Самый простой способ проведения расчетов это – использование готовой программы LaBSim-Flow (Lattice Boltzmann Simulations of Flows). Программа не требует никакой специальной процедуры установки и при запуске автоматически определит параметры имеющихся GPU и предложит выбрать в верхнем меню необходимую для расчетов задачу.



Для моделирования методом LBE с фазовыми переходами разработан соответствующий программный модуль. Очевидно, что алгоритм LBE включает в себя вычисления преимущественно в локальном узле расчетной сетки, за исключением переноса частиц и расчета сил взаимодействия между узлами, что позволяет его эффективно распараллелить на большое количество ядер GPU.

Для примера приведем описание параллельных расчетов, выполнявшихся на графическом ускорителе GTX-580, имеющем 512 потоковых процессоров (ядер). Все ядра имеют доступ к относительно быстрой общей внутренней памяти объемом 3 Гигабайта. В действительности GTX-580 состоит из 16 мультипроцессоров по 32 ядра в каждом. Распараллеливание основано на создании сотен миллионов потоков, каждый из которых осуществляет относительно простые вычисления в узле по одному или по нескольким уравнениям (2) – (8), (10), (11), (13), (14).

Первые три шага алгоритма реализованы в виде отдельных параллельных функций (ядер, **kernel**) для GPU: “**MOVE**”, “**DENSITY**” и “**FORCE**”. Последние два шага алгоритма объединены в одну ядерную функцию условно названную “**COLLISION**”. Каждая ядерная функция выполняет относительно простые вычисления в каждом узле.

Архитектура GPU задает организацию вычислений по блокам, в каждом из которых может запускаться до 1024 потока. Каждый поток выполняется одним ядром. Каждый блок выполняется одним мультипроцессором. Совокупность блоков называется решеткой (**grid**). Последовательность выполнения огромного количества потоков и блоков не оговорена, но их полное завершение до вызова следующей ядерной функции можно синхронизовать.

Каждому ядру GPU через внутренние переменные доступны: размеры блока **blockDim.x** , **blockDim.y** , **blockDim.z** и координаты блока в решетке **blockIdx.x** , **blockIdx.y** и **blockIdx.z** , а также координаты выполняемого в этот момент потока внутри блока **threadIdx.x** , **threadIdx.y** , **threadIdx.z** .

На рис. 3.2 показан пример разбиения трехмерной расчетной области размером $n_x \times n_y \times n_z$ на блоки, а каждого блока – на потоки.

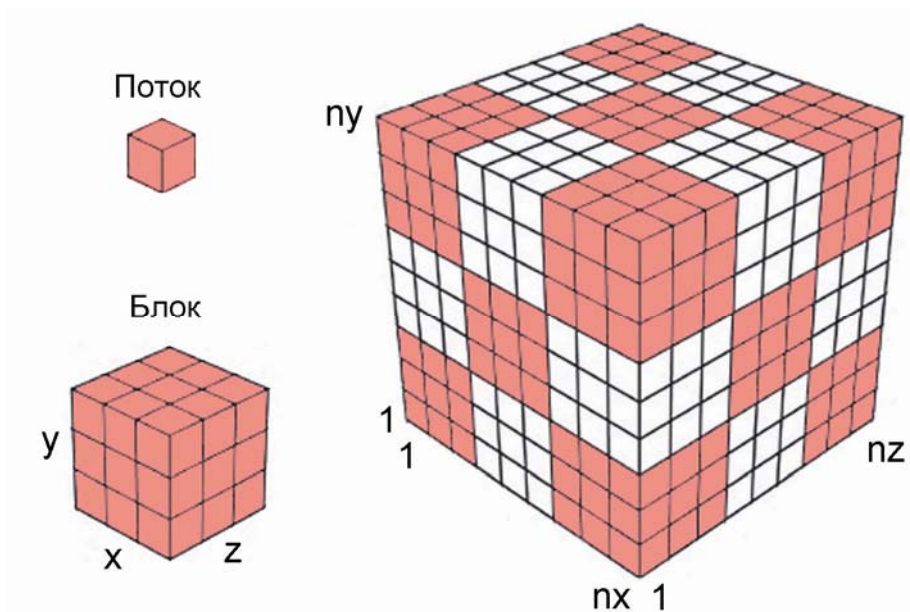


Рисунок 3.2 Пример разбиения расчетной области на блоки и потоки.

В технологии CUDA перед вызовом ядерной функции (например, “**DENSITY**”) необходимо задать размеры блока (**threads**) и размеры решетки (**grid**):

```
dim3 threads(16,16,2);
dim3 grid(nx/threads.x, ny/threads.y, nz/threads.z);
DENSITY <<< grid, threads >>> (... , ...);
```

Перед запуском ядерной функции массивы данных, предназначенные для параллельных вычислений, должны быть переданы в память GPU или уже там находиться. При запуске ядерной функции блоки распределяются между свободными мультипроцессорами или становятся в очередь. Аналогично, потоки внутри мультипроцессора распределяются по ядрам для исполнения или становятся в очередь.

Все данные хранятся в общей памяти GPU в одномерных массивах. Каждый поток способен вычислить индекс i элемента, для которого данный поток должен выполнить вычисления:

$$\begin{aligned}
 i = & (\text{blockIdx.z} * \text{blockDim.z} + \text{threadIdx.z} + 1) * \text{ny} * \text{nx} \\
 & + (\text{blockIdx.y} * \text{blockDim.y} + \text{threadIdx.y} + 1) * \text{nx} \\
 & + \text{blockIdx.x} * \text{blockDim.x} + \text{threadIdx.x} + 1 .
 \end{aligned}$$

Так как основным ограничением при использовании GPU является объем быстрой внутренней памяти устройства, то с целью оптимизации памяти на шаге

переноса использовался всего один буферный массив **buff** для всех функций распределения N_k (рис. 3).

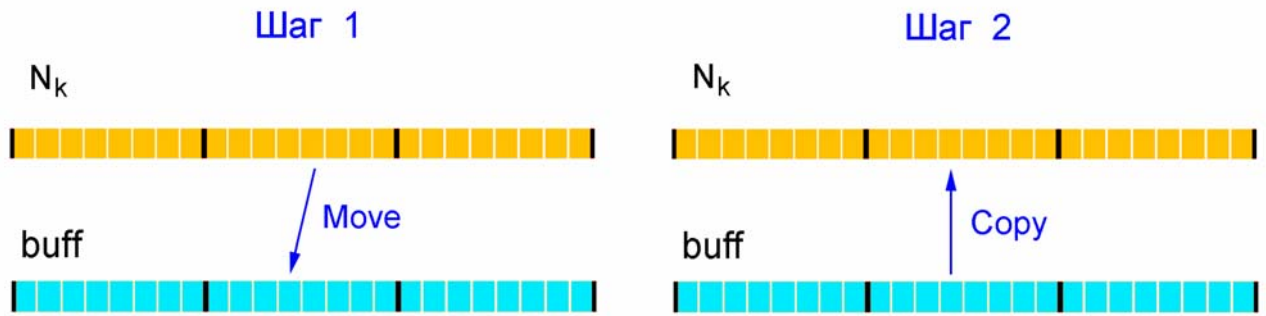


Рисунок 3.3 Схема переноса значений функций распределения N_k в соседние узлы через буферный массив.

Время, затрачиваемое функцией “**COLLISION**” для расчета всех узлов сетки $192 \times 192 \times 192$ за один шаг по времени для однокомпонентной двухфазной модели LBE показано на рис. 3.4. Оптимальными для этой ядерной функции оказались двумерные блоки размером $16 \times 16 \times 1$.

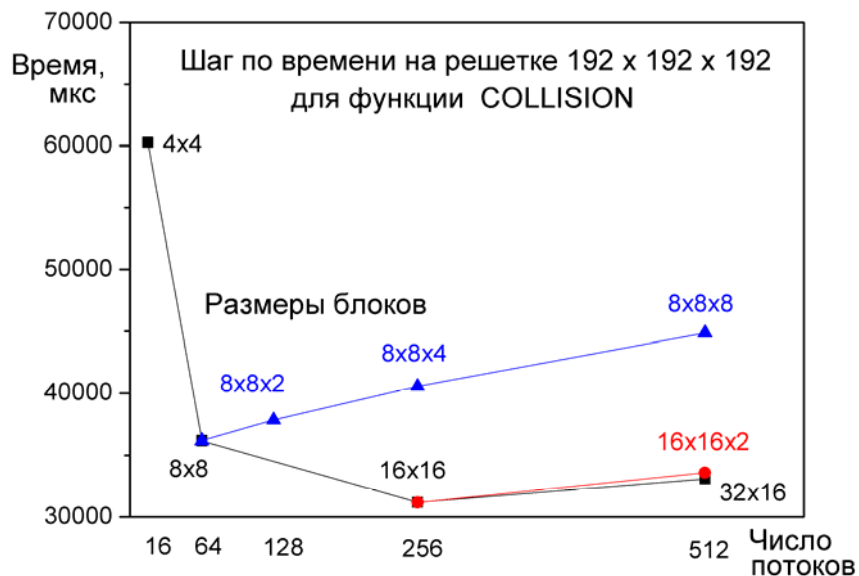


Рисунок 3.4 Время, затрачиваемое на один шаг вычисления ядерной функции **COLLISION**, при разных размерах блоков.

При вычислениях одного шага по времени на устройстве GTX-580 затраты времени на выполнение каждой параллельной функции (**kernel**) на сетке $256 \times 256 \times 224$ (14.7 миллионов узлов) показаны в таблице 1 для случая оптимизации

объема памяти. Для первых четырех функций использовались двухмерные блоки $16 \times 16 \times 1$.

Таблица 1 Затраты времени на вычисления ядерных функций во всех узлах за шаг LBE.

Функция	мкс/шаг	%
Collision	66577	42.5
Density	21299	13.6
Force	13934	8.9
Move +Copy	49944	31.9
Boundaries	1392	0.9
Всего:	153146	100

Чистые затраты времени на выполнение всех ядерных функций за один шаг LBE составляют примерно 10 нс на один узел. При этом производительность одного графического процессора GTX-580 для трехмерной модели LBE с фазовыми переходами составляет ~ 100 MNUPS (Million Node Updates Per Second), то есть до 100 миллионов узлов сетки в секунду.

Для варианта метода LBE с фазовыми переходами ускорение нашего алгоритма для одной карты GTX-580 достигало 70-90 раз при вычислениях с двойной точностью по сравнению с одним ядром процессора Intel Core 2 Duo с частотой 3.3 ГГц [31]. Для трехмерных расчетов использовались расчетные сетки размерами до $256 \times 256 \times 224$ для GTX-580 при 3 Гб общей внутренней памяти.

3.5 Описание алгоритма моделирования методом подвижных клеточных автоматов

Пусть N – число подвижных клеточных автоматов (МСА) в ансамбле. Для описания ансамбля используется запись PARTICLES, в которой хранятся массивы размерности N – координаты центра масс автомата, компоненты скорости, ускорения, угловой скорости, углового ускорения, углов поворота, величина объемной деформации автомата.

Такая организация данных об автоматах имеет два преимущества.

- 1) Она позволяет передавать все данные о клеточных автоматах с CPU на GPU по одной ссылке, что удобно при программировании обращения к ядерным функциям.
- 2) Обеспечивает синхронизацию обращений на GPU к памяти, что дает выигрыш в производительности вычислений по сравнению с несинхронизованными данными.

Для описания связей между автоматами в программе используется массив записей LINKS[i][j], в котором для каждой частицы i указаны номера частиц-соседей, связанных с ней (индекс j), относительные углы поворота автоматов для вычисления сил вязкого трения и моментов сил при деформации изгиба.

Расчет динамики подвижных клеточных автоматов на каждом шаге по времени состоит из двух этапов. На первом этапе устанавливаются связи между автоматами. Для этого используется ядерная функция

Set_Links <<<grid2,block2>>> (PARTICLES, LINKS, INDEX);

Значения полей массива LINKS обновляются в соответствии с новой пространственной конфигурацией ансамбля подвижных клеточных автоматов. Массив INDEX указывает количество соседей у каждого автомата.

Для расчета сдвиговых деформаций и изгиба необходимо передавать информацию об относительных углах поворота в каждой паре автоматов с текущего шага по времени на следующий. Для этого используется ядерная функция:

Update_Links <<<grid2,block2>>> (LINKS, LINKS_1, INDEX);

Здесь используется дополнительный массив LINKS_1 для временного хранения информации о парах автоматов. Фактически, это копия массива LINKS с предыдущего временного шага.

Каждый шаг по времени разбивается на M промежуточных шагов, чтобы обеспечить устойчивость алгоритма Верле.

Для вычисления каждого вида сил (упругих, объемных, вязких и т.д.) используется своя ядерная функция, что обеспечивает гибкость применения алгоритма для разных моделируемых ситуаций.

Последовательность вызовов ядерных функций за один шаг вычислений динамики ансамбля МСА на GPU выглядит следующим образом:

Verlet_Coord_Step <<<grid2,block2>>> (PARTICLES); – вычисление скорости по алгоритму Верле.

Walls <<<grid2,block2>>> (PARTICLES); – расчет граничных условий.

Free_Accel <<<grid2,block2>>> (PARTICLES); – обнуление значений ускорений.

Deform <<<grid2,block2>>> (PARTICLES, LINKS, INDEX); – расчет объемной деформации клеточного автомата.

Force_Volume <<<grid2,block2>>> (PARTICLES, LINKS, INDEX); – расчет объемной силы, действующей на автомат со стороны соседей.

Force_Elastic <<<grid2,block2>>> (PARTICLES, LINKS, INDEX); – расчет упругих сил, действующих на автомат.

Force_Shift <<<grid2,block2>>> (PARTICLES, LINKS, INDEX); – расчет поверхностных сил, обусловленных сдвиговыми напряжениями.

Force_Viscosity <<<grid2,block2>>> (PARTICLES, LINKS, INDEX); – расчет вязких сил.

Verlet_Vel_Step <<<grid2,block2>>> (PARTICLES); – шаг алгоритма Верле.

Здесь использованы одномерные блоки. Количество блоков и потоков при вычислении на GPU задается соответственно переменными **grid2** и **block2**

```
dim3 grid2(num_blocks);
```

```
dim3 block2(num_threads);
```

Начальные данные задаются в основной части программы. Они включают начальное расположение автоматов в области моделирования, начальные ориентации автоматов, значения начальных скоростей, угловых скоростей в момент времени $t = 0$.

Выводы по главе 3

Разработан экспериментальный образец программных реализаций метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов для параллельных расчетов на графических процессорах. Созданный ЭО позволяет выполнять расчеты многокомпонентной гидродинамики, тепломассопереноса, фазовых переходов жидкость-пар и механических деформаций. Осуществлено автоматическое распараллеливание на вычислительные ядра GPU, а также на несколько GPU на одном компьютере (узле). Программы позволяют пользователю описывать необходимую геометрию расчетной области, задавать начальные условия, проводить расчеты с визуализацией текущего состояния и сохранять полученные результаты в файлы ряда форматов для последующего анализа. ЭО обладает свойством мультиплатформенности, то есть работает как на компьютерах с операционной системой Windows, так и с операционной системой Linux. Кроме того, ряд расчетов был выполнен на кластере Новосибирского государственного

университета SL390s-G7, на котором каждый узел имеет по 3 GPU Tesla M2090. Каждый GPU имеет 6 Гигабайт внутренней памяти. Операционная система “Linux Enterprise server 11”.

4 РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ И МЕТОДИКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОБРАЗЦА ПРОГРАММНЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ АЛГОРИТМОВ И МЕТОДОВ.

Разработана программа и методика экспериментальных исследований экспериментального образца программных реализаций алгоритмов и методов. См. раздел 5 и Приложение 24.2 «Программа и Методика экспериментальных исследований».

5 ПРОВЕДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОБРАЗЦА ПРОГРАММНЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ МЕТОДА РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА И МЕТОДА ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ. СОПОСТАВЛЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ С ИЗВЕСТНЫМИ АНАЛИТИЧЕСКИМИ И ЧИСЛЕННЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ

Для исследования работы используемых моделей течений и для проверки их реализации был проведен ряд качественных и количественных сравнений результатов расчета с известными решениями.

5.1 Простое течение

5.1.1 Сравнение с решением задачи о распаде разрыва

Один из традиционных способов проверки газодинамических расчетов – это сравнение результатов с аналитическим решением задачи об одномерном распаде разрыва.

Будем искать распределения плотности – $\rho(x,t)$ и массовой скорости – $u(x,t)$ для изначально кусочно-постоянных распределений: $\rho(x) = \rho_{0l}$, $u(x) = u_{0l}$ для $x < 0$ и $\rho(x) = \rho_{0r}$, $u(x) = u_{0r}$ для $x > 0$. При этом, будем использовать одно уравнение состояния для всей расчетной области – $p = \rho T$.

В зависимости от начальных условий, решение составляется из ударной волны и центрированной простой волны разрежения. Всего возможно 4 варианта:

- 1) Волна разрежения влево, ударная волна вправо;

- 2) Ударная волна влево, волна разрежения вправо;
- 3) Ударная волна влево, ударная волна вправо;
- 4) Волна разрежения влево, волна разрежения вправо;

Для выбора реализующегося варианта необходимо построить $p-u$ диаграмму.

Используя законы сохранения потока массы и импульса, и уравнение состояния, получаем соотношения на ударной волне: $p_{shock} = p_0 + \rho_0 u D$, $D = (u + (u^2 + 4T)^{1/2}) / 2$.

Используя известное в газовой динамике решение в виде простых волн, получаем соотношения для волн разрежения распространяющихся вправо и влево:

$$p_r = p_{0r} \exp((u_r - u_{0r}) / \sqrt{T}), \quad p_l = p_{0l} \exp(-(u_l - u_{0l}) / \sqrt{T}).$$

Для сшивки двух решений необходимо решать нелинейное уравнение для нахождения общей массовой скорости. Этого можно избежать, заменив зависимость давления в ударной волне от массовой скорости на давление в волне сжатия. Для течений с малым числом Маха это приближение выполняется с хорошей точностью (рис. 5.1).

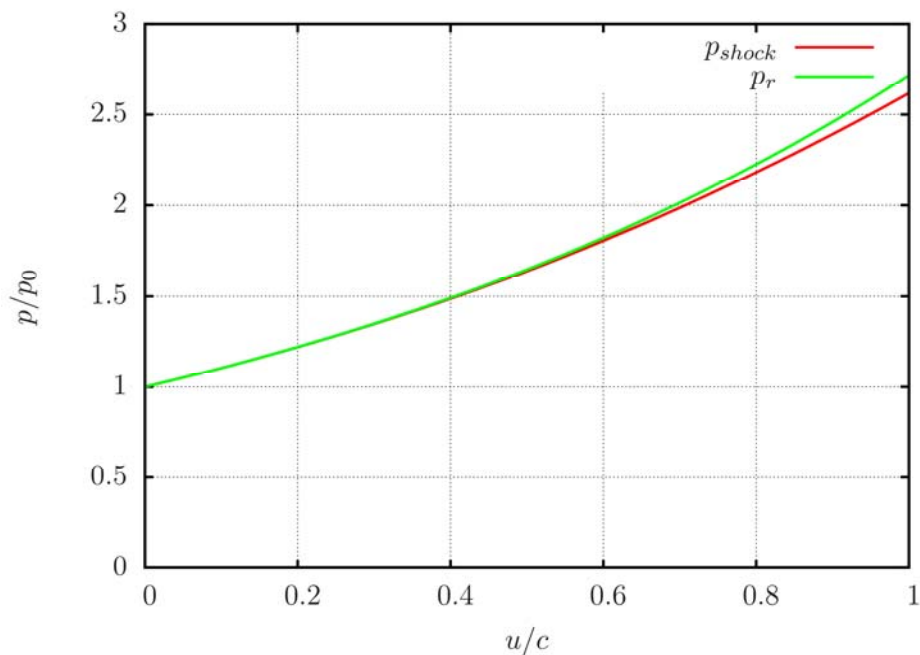


Рисунок 5.1 Сравнение зависимостей давления от массовой скорости для ударной волны (p_{shock}) и волны сжатия (p_r).

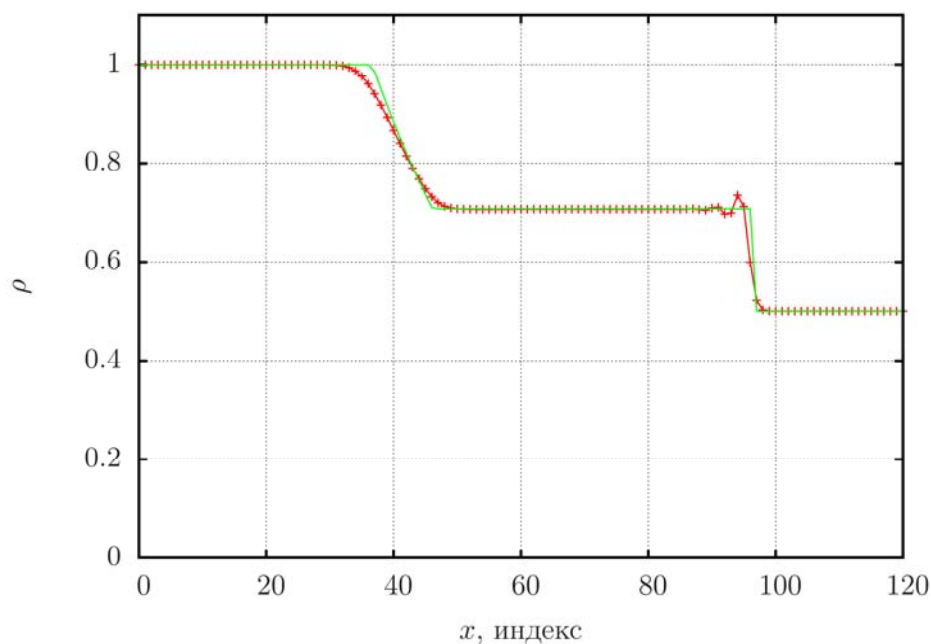


Рисунок 5.2 Сравнение результатов численного расчета одномерного распада разрыва с аналитическим решением без учета влияния вязкости.

В рамках сделанного приближения общая массовая скорость легко находится – $u_* = (u_{ol} + u_{or})/2 + \sqrt{T} \ln(p_{ol} / p_{or})/2$ и можно получить явные аналитические выражения для параметров течения.

Сравнение численного решения с аналитическим (рис. 5.2) демонстрирует хорошее согласие. Небольшие расхождения на ударном фронте связаны с разрывностью аналитического решения, а отклонения в волне разрежения с отсутствием вязкости в аналитической модели.

5.1.2 Обтекание препятствия

Сравнение с аналитическим решением течения при распаде разрыва демонстрирует хорошее количественное согласие при расчете одномерных течений. Для тестирования корректности моделирования многомерных течений был выбран качественный тест – обтекание потоком жидкости покоящегося параллелепипеда (рис. 5.3).

Тест демонстрирует корректность реализации периодических граничных условий и условий “прилипания” скорости на твердых стенках внутри расчетной области.

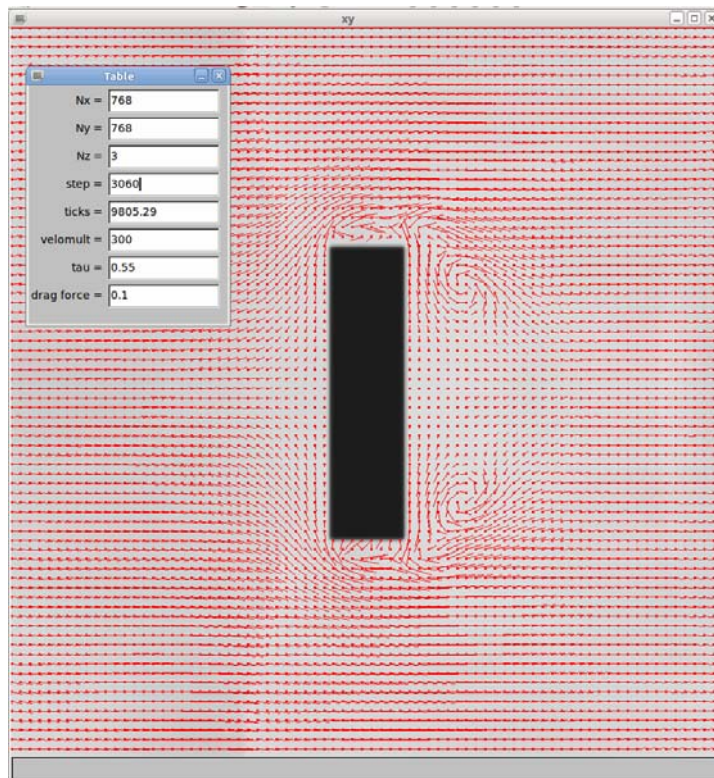


Рисунок 5.3 Пример плоского обтекания пластины, помещенной перпендикулярно однородному потоку жидкости. Течение жидкости слева направо.

5.2 Многокомпонентная гидродинамика

5.2.1 Сравнение с решением задачи о течении Куэтта

Рассмотрим ламинарное течение двух слоев одинаковых жидкостей отличающихся только коэффициентами вязкости между двумя параллельными стенками, движущимися относительно друг друга. Для определенности примем отношение коэффициентов вязкости $\nu_1 / \nu_2 = 2$, безразмерные скорости стенок ± 0.05 .

Независимо от начальных распределений параметров, через некоторое время устанавливается кусочно-линейный профиль скорости между пластинами. Приведенное на рис. 5.4 сравнение с аналитическим решением демонстрирует хорошее согласие, что доказывает правильность моделирования многокомпонентных течений.

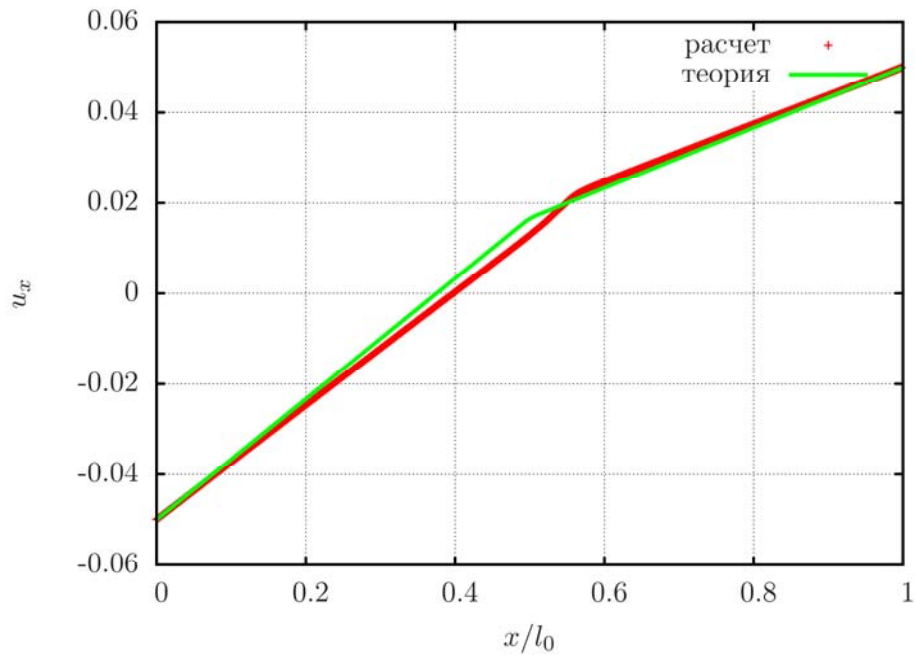
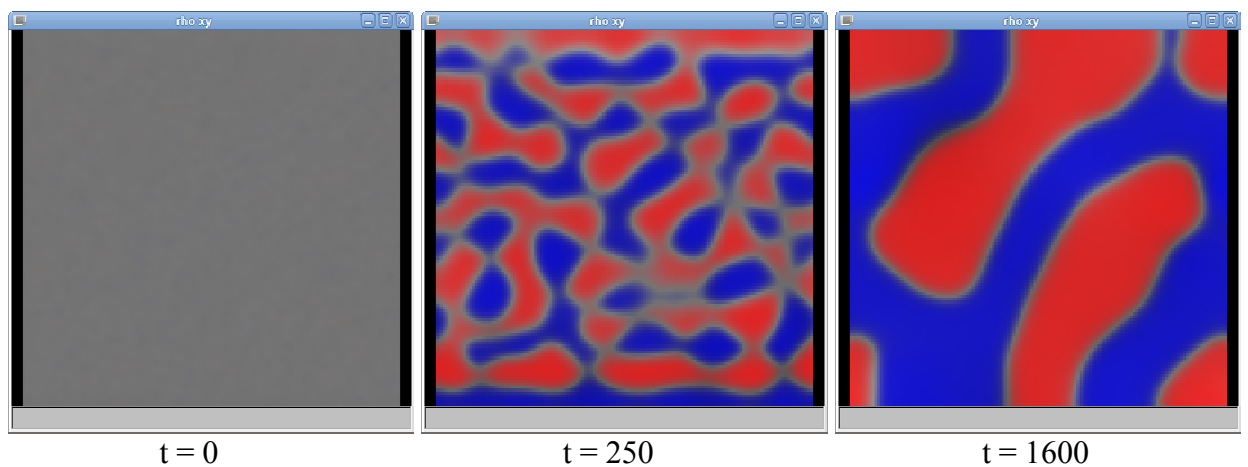


Рисунок 5.4 Сравнение результатов численного расчета течения Куэтта с аналитическим решением.

5.2.2 Разделение смеси двух жидкостей в поле тяжести

На рис. 5.5 приведены результаты моделирования разделения двух жидкостей с разными плотностями в поле тяжести. Изначально жидкости однородно смешаны. Происходит образование мелкомасштабных возмущений плотности компонентов, которые затем укрупняются. В конце более тяжелая жидкость занимает нижнюю половину области, а более легкая – верхнюю. Расчеты проводились на кластере Новосибирского государственного исследовательского университета SL390s-G7 с операционной системой “Linux Enterprise server 11”.



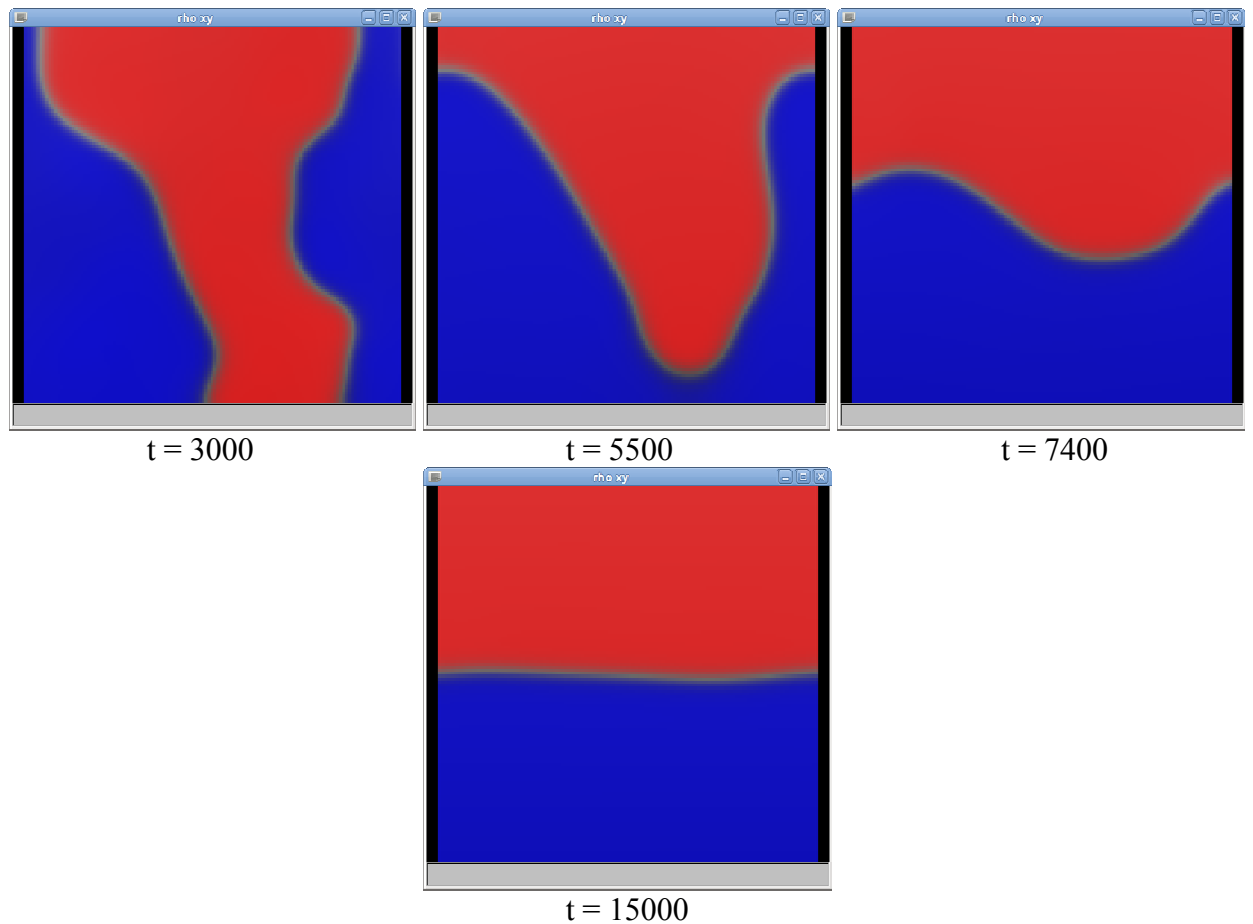


Рисунок 5.5 Распределения плотностей в разные моменты времени. Красный цвет – плотность одной компоненты, синий цвет – плотность другой.

5.3 Тепломассоперенос

На рис. 5.6 приведены результаты моделирования переноса нагретой области в однородном потоке теплопроводящей среды. Область переносится вправо без искажения формы. Происходит также некоторое расплывание температуры за счет теплопроводности.

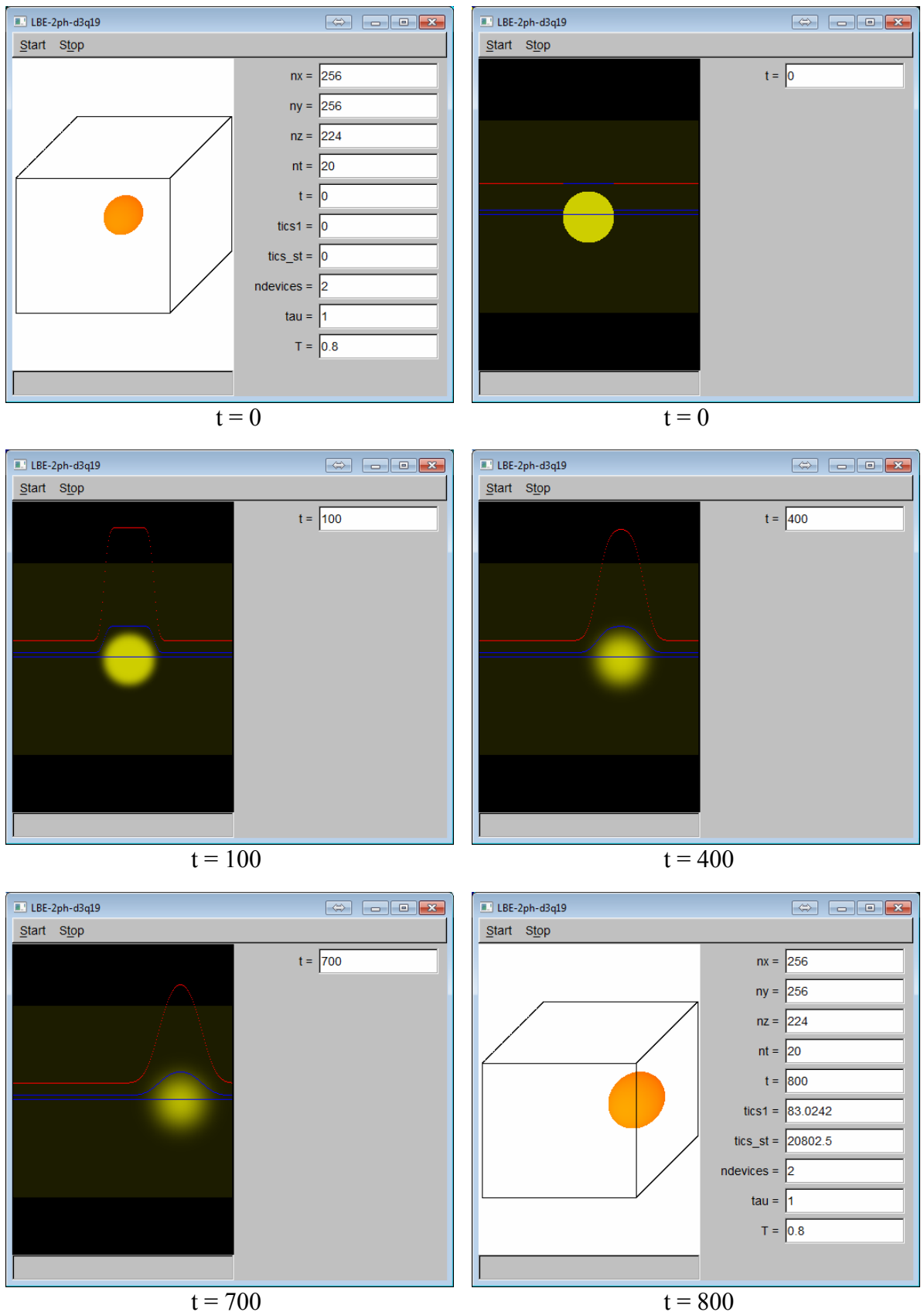


Рисунок 5.6 Распределение внутренней энергии и температуры при переносе нагретой области вещества вместе с течением жидкости, направленным направо, с учетом теплопроводности. Расчет на двух графических процессорах GTX-580 с 3 гигабайтами внутренней памяти каждый (рабочая станция, собранная в ИГиЛ на этапе № 1 Госконтракта). Операционная система Windows 7.

5.4 Двухфазные системы жидкость–пар

Ниже приведены результаты моделирования ряда двухфазных систем жидкость–пар.

Для сопоставления с известными аналитическими результатами рассчитывалось стационарное сосуществование жидкой и паровой фаз вещества, имеющее уравнение состояния Ван-дер-Ваальса. В таблице представлены полученные при моделировании величины удельного объема жидкости и пара для плоской границы раздела, а также аналитические значения, вычисленные с помощью правила Максвелла. Параметры T_c - температура в критической точке, V_c - объем в критической точке.

T/T_c	$V_{\text{жидк}}/V_c$, расчет	$V_{\text{жидк}}/V_c$, теория	$V_{\text{пар}}/V_c$, расчет	$V_{\text{пар}}/V_c$, теория
1	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
0.8	0.5174	0.5174	4.1665	4.1725
0.6	0.4326	0.4326	16.696	16.729

Видно хорошее совпадение расчетных и теоретических величин.

На рис. 5.7 показаны результаты трехмерного моделирования спиновальной декомпозиции первоначально однородного состояния вещества, находящегося под спиновалью, на двухфазную систему жидкость-пар. Со временем мелкомасштабные структуры укрупняются.

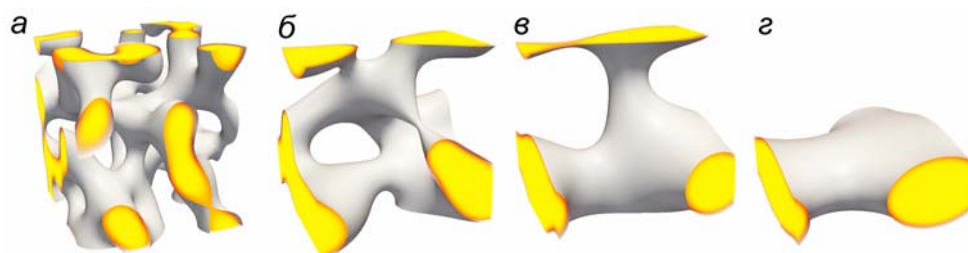


Рисунок 5.7 Спиновальная декомпозиция. Паровая фаза показана прозрачной. $t = 2000$ (а), 3000 (б), 4000 (в), 7600 (г). Расчетная сетка $96 \times 96 \times 96$.

На рис. 5.8 показан пример расчета спиновальной декомпозиции в трехмерной области размерами $400 \times 400 \times 288$ на двух GPU (Tesla-M2090, каждый позволяет использовать чуть больше 5 гигабайт внутренней памяти) на кластере Новосибирского государственного исследовательского университета SL390s-G7 с операционной системой “Linux Enterprise server 11”.

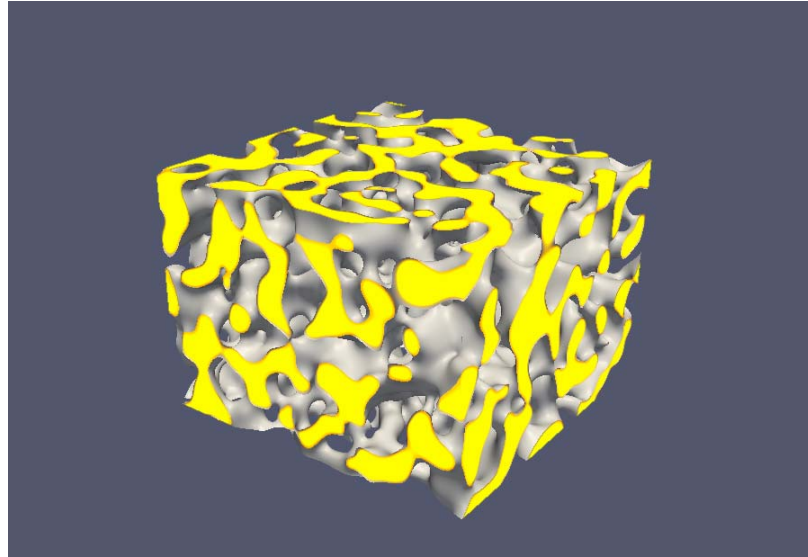


Рисунок 5.8 Спинодальная декомпозиция. Расчетная сетка $400 \times 400 \times 288$. $t = 2000$. Паровая фаза показана прозрачной.

На рис. 5.9 показаны результаты моделирования термокапиллярного эффекта для свободно висящей пленки, вдоль которой имеется неравномерное распределение температуры

$$T = T_0 + \Delta T(1 + \cos(\pi(r/R)^2)), \quad \text{при } r < R, \quad (50)$$

$$T = T_0, \quad \text{при } r \geq R,$$

показанное на рис. 5.7а, где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Граничные условия по x и по y периодические.

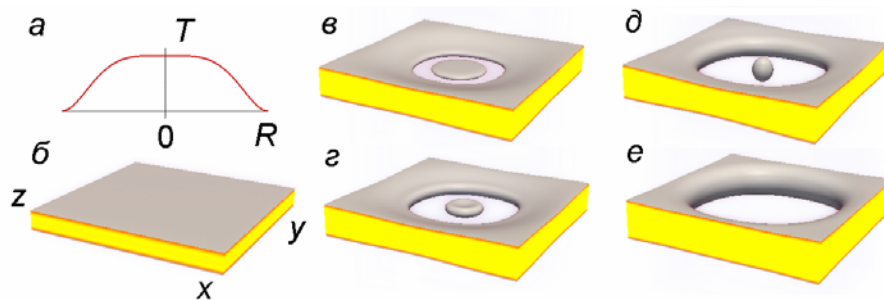


Рисунок 5.9 Трехмерное моделирование термокапиллярного эффекта (эффект Марангони) для свободно висящей пленки жидкости. Толщина пленки $d = 24$. Расчетная сетка $256 \times 256 \times 224$. $t = 0$ (б), 3100 (в), 3400 (г), 3700 (д), 4200 (е).

За счет распределения температуры вдоль пленки и, соответственно, поверхностного натяжения происходит неоднородное растяжение пленки. Разрыв пленки жидкости происходит по окружности некоторого радиуса там, где градиент

температуры и поверхностного натяжения близки к максимальным значениям. В результате в центре образуется диск из жидкости, который за счет поверхностного натяжения сначала трансформируется в тороидальное образование, а затем, после осцилляций, в каплю. Позже происходит постепенное испарение капли жидкости.

В случае неосесимметричного распределения температуры можно получить достаточно сложную геометрию отверстий на первой стадии разрушения пленки (рис. 5.10). Позже из-за поверхностного натяжения контуры отверстия сглаживаются.

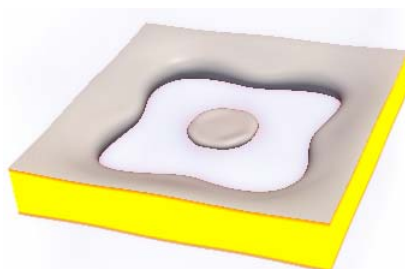


Рисунок 5.10 Расчет разрушения пленки жидкости из-за эффекта Марангони при некотором неосесимметричном распределении температуры $T = T(x, y)$.

На рис. 5.11 показан процесс разрушения тонкостенного жидкого пузыря, заполненного газом. В этом случае использовался метод LBE для двух компонентов: газ, находящийся внутри пузыря, и жидкий пузырь. Для жидкости использовано уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, допускающее фазовый переход жидкость-пар (испарение капель), а для газа – обычное газовое уравнение состояния.

В некоторый момент времени в стенке пузыря возникают отверстия, которые быстро расширяются (рис. 5.11а и 5.11б). Затем происходит образование брызг в виде капель жидкости (рис. 5.11в и 5.11г), которые позже испаряются.

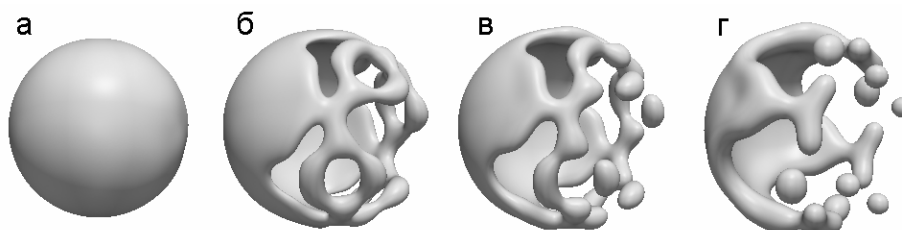


Рисунок 5.11 Моделирование разрушения трехмерного тонкостенного жидкого пузыря. Расчетная сетка $192 \times 192 \times 192$. $t = 0$ (а), 1000 (б), 1100 (в), 1350 (г).

5.5 Деформации и разрушение твердых тел

На рис. 5.12 показан расчет продольной упругой деформации двумерного твердого образца методом подвижных клеточных автоматов. Под действием вертикальной силы, приложенной к верхней грани в образце возникают продольные затухающие колебания.

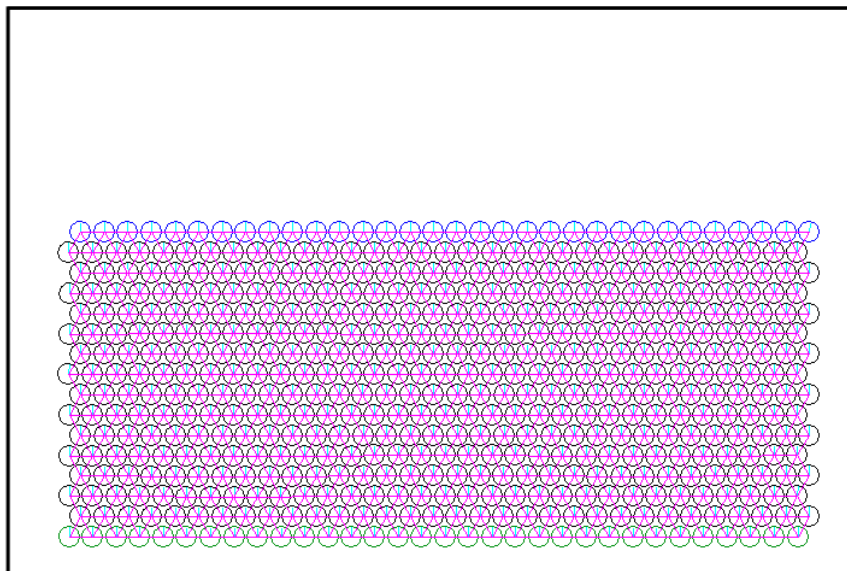


Рисунок 5.12 Моделирование упругих деформаций в прямоугольном образце из 512 подвижных клеточных автоматов. Черными кружками показан размер автоматов в отсутствие деформации. Голубые стрелки указывают ориентацию автоматов, малиновыми отрезками отмечены существующие связи между автоматами. Синим и зеленым выделены верхний и нижний слои автоматов, соответственно.

На рис. 5.13 показаны результаты расчетов при нагружении вертикальной колонны импульсным ударом сверху. Наблюдается изгибная неустойчивость колонны, возникновение трещин в образце и отколовшиеся фрагменты материала.

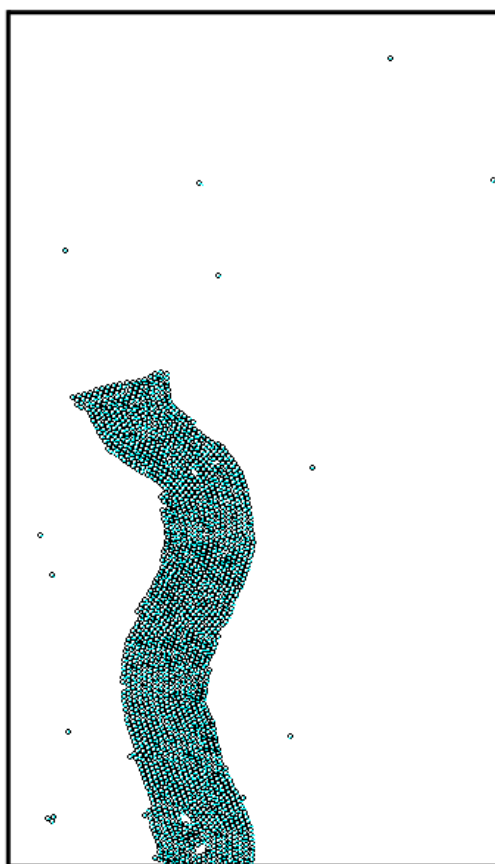


Рисунок 5.13 Моделирование деформаций и разрушения материала при импульсной нагрузке вертикальной колонны ударом сверху.

На рис. 5.14 показаны результаты расчета сдвиговых деформаций в прямоугольном образце. Нижний слой материала закреплен, а верхний движется в горизонтальном направлении с постоянной скоростью. Наблюдается возникновение растягивающих напряжений и отрыв материала в местах его закрепления.

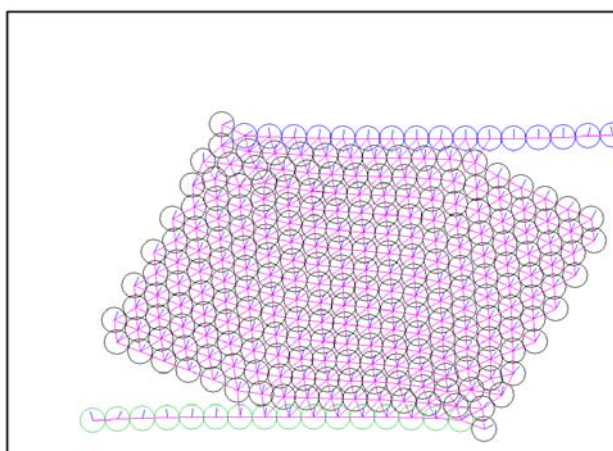


Рисунок 5.14 Моделирование сдвиговых деформаций и начало разрушения прямоугольного образца.

Выводы по главе 5

Проведены экспериментальные исследования экспериментального образца программных реализаций метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов. Выполнены расчеты ряда задач многокомпонентной гидродинамики, тепломассопереноса, фазовых переходов жидкость-пар и механических деформаций. См. также Приложение 24.2 Программа и методика экспериментальных исследований ЭО и Протокол экспериментальных исследований экспериментального образца.

6 ДОРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОБРАЗЦА С УЧЕТОМ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

С учетом экспериментальных исследований были доработаны компоненты экспериментального образца “LaBSim-Flow”:

- 1) Модуль Multiphase
- 2) Модуль Multicomponent
- 3) Модуль Heat and mass transfer
- 4) Модуль MCA

7 РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОЙ ДОКУМЕНТАЦИИ НА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ ОБРАЗЕЦ ПРОГРАММНЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ МЕТОДА РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА И МЕТОДА ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

Разработана следующая программная документация:

- 1) Спецификация 2011-1.4-514-029-004 С
- 2) Описание применения 2011-1.4-514-029-004 ОПР
- 3) Руководство системного программиста 2011-1.4-514-029-004 РСП
- 4) Руководство оператора 2011-1.4-514-029-004 РО
- 5) Текст программы 2011-1.4-514-029-004 ТП
- 6) Описание программы 2011-1.4-514-029-004 ОП

8 КОРРЕКТИРОВКА ТЕХНИЧЕСКОЙ ДОКУМЕНТАЦИИ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

По результатам экспериментальных исследований были доработаны:

- 1) Описание применения 2011-1.4-514-029-004 ОПР
- 2) Руководство системного программиста 2011-1.4-514-029-004 РСП
- 3) Руководство оператора 2011-1.4-514-029-004 РО
- 4) Текст программы 2011-1.4-514-029-004 ТП
- 5) Описание программы 2011-1.4-514-029-004 ОП

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод решеточных уравнений Больцмана и метод подвижных клеточных автоматов представляют собой новый класс методов, использующих мезоскопический подход к описанию вещества, и основаны на дискретных моделях сплошной среды.

В результате выполнения второго этапа работы выполнена программная реализация метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов.

Выбраны алгоритмы, допускающие распараллеливание на новейших высокопроизводительных графических процессорах, что позволило значительно увеличить скорость расчетов, а также в несколько раз сократить электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности. Для распараллеливания алгоритма на большое количество ядер графических процессоров фирмы NVIDIA выбрана технология программирования CUDA.

Создан экспериментальный образец программных реализаций этих методов и алгоритмов и полный комплект документации на ЭО. Проведены экспериментальные исследования ЭО (см. главу 5).

Таким образом, в результате выполнения второго этапа Государственного контракта проведены следующие работы:

- 1) Разработана теория математического моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики, тепломассопереноса, фазовых переходов жидкость-пар и механических деформаций.
- 2) Выбраны способы решения поставленных задач и разработаны методы и алгоритмы моделирования, основанные на применении решеточных методов и методов клеточных автоматов.
- 3) Разработан Экспериментальный Образец программных реализаций (ЭО) метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов для параллельных расчетов на графических процессорах.
- 4) Разработаны Программа и Методика (ПМ) экспериментальных исследований ЭО.
- 5) Проведены экспериментальные исследования ЭО.

- 6) Результаты моделирования сопоставлены с известными аналитическими и численными результатами.
- 7) Разработана программная документация на ЭО.
- 8) Проведено дополнительное патентное исследование в соответствии ГОСТ Р 15.011-96.
- 9) Реализованы мероприятия по достижению программных индикаторов и показателей (п. 8.2 ТЗ).
- 10) Разработан промежуточный отчет о НИР. Отчет рассмотрен и утвержден на Ученом совете.
- 11) Проведен нормоконтроль Отчета о НИР на соответствие ГОСТ 7.32-2001.
- 12) Разработана отчетная документация в соответствии с требованиями технического задания и актов Заказчика.
- 13) Выполнены доработка ЭО и корректировка технической документации с учетом результатов экспериментальных исследований, что осуществлялось в реальном режиме времени в процессе создания ЭО.
- 14) За счет внебюджетного финансирования были выполнены работы по организации трех рабочих мест (сборка компьютеров, оснащение их мощными графическими процессорами и оснащение их полным комплектом необходимого программного обеспечения), установке и настройке точки доступа, а также по запуску программы НТТР-сервера для поддержки проекта в сети Интернет.

Практическая ценность проведенных работ заключается в создании Экспериментального образца программы для моделирования мультифизических явлений на графических процессорах методами LBE и MCA, а также в выполнении дополнительного патентного исследования. ЭО работает на нескольких GPU как на компьютерах с операционной системой Windows, так и с операционной системой LINUX.

Научные результаты работы (разработанные алгоритмы и методы моделирования, экспериментальный образец программных реализаций), полученные на втором этапе НИР, будут использованы на третьем этапе НИР при разработке Технического задания на ОКР по теме «Разработка программно-аппаратного комплекса, основанного на применении метода решеточных уравнений Больцмана и

методов клеточных автоматов и предназначенного для численного исследования мультифизических систем». Внедрение результатов в инженерную практику возможно только после окончания НИР и ОКР.

На данном этапе исследований экономической эффективности результаты НИР иметь не могут. Вместе с тем, Ученый совет ИГиЛ СО РАН, на котором принимался отчет по второму этапу работы, отметил перспективность продолжения работ на третьем этапе и рекомендовал использовать накопленный опыт и приступить к разработке проекта технического задания на ОКР.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 McNamara G. R., Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // *Physical Review Letters*. 1988. Vol. 61, N 20. P. 2332–2335.
- 2 Higuera F. J., Jiménez J. Boltzmann approach to lattice gas simulations. // *Europhys. Lett.* 1989. Vol. 9, N 7. P. 663–668.
- 3 Chen S., Doolen G. D. Lattice Boltzmann method for fluid flow // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998. Vol. 30. P. 329–364.
- 4 Aidun C. K., Clausen J. R. Lattice-Boltzmann Method for Complex Flows // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2010. Vol. 42. P. 439–472.
- 5 Li W., Wei X., Kaufman A. Implementing lattice Boltzmann computation on graphics hardware // *Visual Computer*. 2003. Vol. 19. P. 444–456.
- 6 Tölke J., Krafczyk M. TeraFLOP computing on a desktop PC with GPU for 3D CFD // *International Journal of Computational Fluid Dynamics*. 2008. Vol. 22, N 7. P. 443–456.
- 7 Janßen C., Krafczyk M. Free surface flow simulations on GPGPU using the LBM // *Computers and Mathematics with Applications*. 2011. Vol. 61, N 12. P. 3549–3563.
- 8 Obrecht C., Kuznik F., Tourancheau B., Roux J.-J. Multi-GPU implementation of the lattice Boltzmann method // *Computers and Mathematics with Applications*. 2011. In press., doi: 10.1016/j.camwa. 2011.02.020.
- 9 Грачев Н. Е., Дмитриев А. В., Сенин Д. С. Моделирование динамики газа при помощи решеточного метода Больцмана // *Вычислительные методы и программирование*. 2011. Т. 12. С. 227–231.
- 10 Broadwell J. E. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method // *J. Fluid Mech.* 1964. Vol. 19. P. 401–414.
- 11 Qian Y. H., Orzag S. A. Lattice BGK models for the Navier – Stokes equation: Nonlinear deviation in compressible regimes // *Europhys. Lett.* 1993. Vol. 21. P. 255–259.
- 12 Bhatnagar P. L., Gross E. P., Krook M. K. A model for collision process in gases. I. Small amplitude process in charged and neutral one-component system // *Physical Review*. 1954. Vol. 94, N 3. P. 511–525.

- 13 Koelman J. M. V. A. A simple lattice Boltzmann scheme for Navier–Stokes fluid flow // *Europhys. Lett.* 1991. Vol. 15, N 6. P. 603–607.
- 14 Kupershtokh A. L. Calculations of the action of electric forces in the lattice Boltzmann equation method using the difference of equilibrium distribution functions // Доклады VII Межд. научн. конф. “Современные проблемы электрофизики и электрогидродинамики жидкостей”, Санкт-Петербург, 2003, с. 152–155.
- 15 Kupershtokh A. L. New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation // *Proc. of the 5th International EHD Workshop, Poitiers, France, 2004*, pp. 241–246.
- 16 Куперштох А. Л. Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // *Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”*. 2004. Т. 4, № 2. С. 75–96.
- 17 Kupershtokh A. L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // *Computers and Mathematics with Applications*. 2010. Vol. 59, N 7. P. 2236–2245.
- 18 Ginzburg I., Adler P.M. Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model // *J. Phys. II France*. 1994. Vol. 4, N 2. P. 191–214.
- 19 Shan X., Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components // *Physical Review E*. 1993. Vol. 47, N 3. P. 1815–1819.
- 20 Yabe T., Aoki T. A universal solver for hyperbolic equations by cubic-polynomial interpolation. I. One-dimensional solver // *Computer Physics Communications*. 1991. Vol. 66. P. 219–232.
- 21 Yabe T., Ishikawa T., Wang P., Aoki T., Kadota Y., Ikeda F. A universal solver for hyperbolic equations by cubic-polynomial interpolation. II. Two- and three-dimensional solvers // *Computer Physics Communications*. 1991. Vol. 66. P. 233–242.
- 22 Qian Y. H., Chen S. Finite size effect in lattice-BGK models // *International Journal of Modern Physics C*. 1997. Vol. 8, N 4. P. 763–771.
- 23 Zhang R., Chen H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows // *Phys. Rev. E*. 2003. Vol. 67, N 6. P. 066711.
- 24 Куперштох А. Л. Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана // *Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”*. 2005. Т. 5, № 3. С. 29–42.

- 25 Kupershtokh A. L., Karpov D. I., Medvedev D. A., Stamatelatos C. P., Charalambakos V. P., Pyrgioti E. C., Agoris D. P. Stochastic models of partial discharge activity in solid and liquid dielectrics // IET Science, Measurement and Technology. 2007. Vol. 1, N 6. P. 303–311.
- 26 Kupershtokh A. L., Medvedev D. A., Karpov D. I. On equations of state in a lattice Boltzmann method // Computers and Mathematics with Applications. 2009. Vol. 58, N 5. P. 965–974.
- 27 Kupershtokh A. L. A lattice Boltzmann equation method for real fluids with the equation of state known in tabular form only in regions of liquid and vapor phases // Computers and Mathematics with Applications. 2011. Vol. 61, N 12. P. 3537–3548.
- 28 He X., Shan X., Doolen G. D. Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases // Phys. Rev. E. 1998. Vol. 57, N 1. P. R13–R16.
- 29 Guo Z., Zheng C., Shi B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method // Phys. Rev. E. 2002. Vol. 65, N 4. P. 046308.
- 30 NVIDIA CUDA C. Programming Guide. Version 4.0. 2011.
- 31 Куперштох А. Л. Трехмерное моделирование двухфазных систем типа жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана на GPU // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13. С. 130–138.