

# Численное моделирование пространственных течений разреженного газа с использованием суперЭВМ

В.А. Титарев

Вычислительный центр им. А.А. Дородницына  
ФИЦ "Информатика и Управление" РАН

Дата последнего обновления 6 ноября 2017 г.

- Классические способы моделирования, основанные на уравнениях Навье-Стокса сжимаемого газа, не подходят для описания движений разреженного газа.
- Корректное описание течения возможно на основе кинетических подходов [Коган, 1967, Черчиньяни, 1978, Берд, 1981]: уравнения Больцмана, аппроксимирующих кинетических уравнений, метода прямого статистического моделирования, и других.
- Важной прикладной областью применения теории разреженных газов является исследование медленных течений в различных микроэлектромеханических устройствах (MEMS) [Ho and Tai, 1998], таких как микронасосы и микротурбины, микросопла, системы охлаждения электронных компонентов.
- Течение разреженного газа в прямом канале является наиболее распространенной конфигурацией в микроустройствах. Анализ решения этой задачи в зависимости от длины и формы каналов, величины перепада давления и других параметров посвящено множество работ, см. обзоры [Sharipov and Seleznev, 1994, Шарипов and Селезнев, 2008].

- Другим традиционным приложением уравнений механики разреженного газа является моделирование аэродинамики и теплообмена космических аппаратов, движущихся в верхних слоях атмосферы. При входе аппарата в атмосферу с большой скоростью определяющими являются эффекты разреженности и сильной неравновесности течения, см. например [В.М.Ковтуненко et al., 1977, Ivanov and Gimelshein, 1998].
- Так как экспериментальные исследования данной задачи сопряжены со значительными техническими трудностями, целесообразно основные аэротермодинамические характеристики изучать методами вычислительной физики.
- Указ Президента РФ от 07.07.2011 г. N. 899 определяет приоритетные направления (*Транспортные и космические системы*) и критические технологии (*Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий; Технологии и программное обеспечение распределенных и высокопроизводительных вычислительных систем; Технологии создания ракетно-космической и транспортной техники нового поколения*).
- Таким образом, **развитие численных методов моделирования течений разреженного газа является актуальной задачей математического моделирования**

- Наиболее популярным в настоящее время способом моделирования течений разреженного газа, в частности решения задач гиперзвуковой аэродинамики, является метод прямого статистического моделирования (ПСМ): ЦАГИ, ВЦ РАН, ИТПМ СО РАН, ИТ СО РАН, МФТИ, ЦНИИмаш.
- Вторым по популярности является численное решение кинетического уравнения Больцмана для функции распределения молекул по скоростям с точным либо приближенным (модельным) интегралом столкновений: ВЦ РАН, ИТПМ СО РАН, МАИ, МФТИ, ИТ СО РАН, СПбГУ.
- Также следует отметить дискретные модели для уравнения Больцмана (ИПМ РАН), метод моментов (МАИ, МГУ, ИПМ РАН, МГУ, ИПММех), кинетические схемы (ИПМ РАН)
- Преимущества детерминистических подходов, основанных на решении кинетического уравнения Больцмана:
  - Возможность построения методов высокого порядка аппроксимации по всем переменным, как для стационарных, так и для нестационарных течений.
  - Метод решения хорошо подходит для современных суперЭВМ с many-core процессорами [Воеводин et al., 2012, Semin et al., 2014].
- Развитие параллельных численных методов решения кинетического уравнения является перспективным направлением развития данной области науки.

- Разработка методологии решения пространственных задач механики разреженного газа для течений со сложной геометрией области.
- Разработка нового эффективного численного метода решения кинетического уравнения с приближенными (модельными) интегралами столкновений.
- Создание нового комплекса программ, реализующего данный метод решения и позволяющего проводить вычисления на современных суперЭВМ с десятками тысяч ядер/гиперпотокков.
- Валидация и верификация кинетических уравнений с приближенными интегралами столкновений в приложении к сложным течениям.
- Численное моделирование течений разреженного газа в микроканалах большой конечной длины и сложной формы.
- Численное моделирование обтекания пространственных тел сложной формы гиперзвуковым потоком разреженного газа.

- Состояние газа описывается функцией распределения молекул по скоростям  $f = f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ , где  $(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$  компоненты вектора молекулярной скорости по направлениям  $(x_1, x_{2,3})$  соответственно.
- Точное уравнение Больцмана (УБ) имеет вид [Коган, 1967, Шахов, 1974]

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = I(f, f), \quad I(f, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_m} (f' f'_1 - f f_1) g b d b d \phi d \xi_1$$

- Трудность численного решения УБ в основном состоит в его высокой размерности, присутствии многомерного интеграла столкновений  $I(f, f)$  и сложности построения неявных методов продвижения по времени.
- В результате решение практических задач с гарантированной точностью требует значительных и часто неприемлемых затрат машинного времени.
- Однако заметим, что в приложениях основной интерес представляют интегралы от функции распределения молекул (макропараметры), а не сама функция распределения. Поэтому построение решения точного УБ часто является избыточным.

# Построение приближенных интегралов столкновений

- Альтернатива – построение последовательности приближенных (модельных) кинетических уравнений, которые аппроксимируют точное УБ.
- В работах [Шахов, 1968, Шахов, 1974] предложена общая идея построения аппроксимирующей последовательности модельных уравнений.
- Вместо  $I(f, f)$  будем использовать некоторый **приближенный интеграл столкновений**  $J(f, \mathbf{a})$ , так что уравнение принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = J(f, \mathbf{a})$$

- По аналогии с точным уравнением,  $J$  записывается в виде  $J = Q^+ - \nu f$ . Для нахождения вектора неизвестных параметров  $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)$  используются условия аппроксимации точного интеграла - приближенным:

$$\int \phi(\xi) I(f, f) d\xi = \int \phi(\xi) J(f, \mathbf{a}) d\xi, \quad \phi(\xi) = 1, \xi, \xi^2, \xi\xi^2, \dots$$

- Для одноатомного газа наиболее популярными являются БГК модель (модель Крука) [Bhatnagar et al., 1954] и S-модель Е.М. Шахова [Шахов, 1968].
- Модель БГК дает неверное значение Pr при  $\text{Kn} \rightarrow 0$  и поэтому менее точная.
- Фактическая точность для промежуточных значений  $\text{Kn}$  заранее неясна.

# Расчетные уравнения в безразмерной форме

- С приближенным интегралом столкновений Е.М. Шахова кинетическое уравнение для функции распределения имеет вид [Шахов, 1968]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = J, \quad J = \nu(f^{(s)} - f), \quad \nu = \frac{nT}{\mu} \delta,$$

$$f^{(s)} = f_M \left( 1 + \frac{4}{5}(1 - \text{Pr}) \mathbf{Sc} (c^2 - \frac{5}{2}) \right), \quad \mu = \mu(T) = T^\omega,$$

$$f_M = \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp(-c^2), \quad \mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{T}}, \quad \mathbf{v} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}, \quad \mathbf{S} = \frac{2\mathbf{q}}{nT^{3/2}}.$$

- Макроскопические переменные определяются в виде интегралов по  $\boldsymbol{\xi}$ :

$$\left( n, n\mathbf{u}, \frac{3}{2}nT + n\mathbf{u}^2, \mathbf{q} \right) = \int \left( 1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \frac{1}{2}\mathbf{v}\mathbf{v}^2 \right) f d\boldsymbol{\xi}, \quad p = nT$$

- Степень разреженности газа определяется т.н. параметром разреженности  $\delta$ , который обратно пропорционален числу Кнудсена:

$$\delta = \frac{l_* p_*}{\mu_* \sqrt{2R_g T_*}} = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{\text{Kn}} \approx \frac{0.9}{\text{Kn}}, \quad \text{Kn} = \frac{\lambda_*}{l_*}.$$

Здесь  $\lambda_*$  длина пробега при некоторых заданных условиях \* (например, в набегающем потоке).



- На границах задаем  $f$  для молекул, вектор скорости которых направлен внутрь расчетной области ( $\xi_n > 0$ ):

- для зеркального отражения от плоскости симметрии имеем

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1), \quad \boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\xi} - 2\xi_n \mathbf{n}$$

- на поверхности тела с заданной температурой

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{n_w(t, \mathbf{x})}{(\pi T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right), \quad n_w = 2 \frac{\sqrt{\pi}}{T_w} N_i, \quad N_i = - \int_{\xi_n < 0} \xi_n f d\xi$$

- На входной границе в задачах внешней аэродинамики ( $n_\infty = T_\infty \equiv 1$ )

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = (\pi)^{-3/2} \exp(-c_\infty^2)$$

- На выходной границе ставится локально-максвелловская функция

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f_M(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{n(t, \mathbf{x})}{(\pi T(t, \mathbf{x}))^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(t, \mathbf{x}))^2}{T(t, \mathbf{x})}\right)$$

- Начальное условие - локально-максвелловская функция

$$f(t = 0, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f_M(t = 0, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$$

- Сложности, возникающие при численном решении кинетического уравнения
  - Большая размерность задачи: шестимерное фазовое пространство + время
  - Решение уравнения (функция распределения) содержит разрывы даже для гладких граничных и начальных условий
  - Уравнение становится жестким в областях течения с малым локальным числом Кнудсена  $Kn$
- В работе предлагается оригинальный вариант метода дискретных скоростей [Титарев, 2010, Titarev, 2012a, Titarev et al., 2014a], который имеет следующие преимущества по сравнению с известными в литературе методами
  - Могут использоваться многоблочные структурированные, либо произвольные неструктурированные сетки независимо как в физическом, так и в скоростном пространствах
  - Численный метод консервативен по интегралу столкновений для любого приближенного интеграла столкновений (БГК, Шахова, Рыкова, ...)
  - Применяется неоднородная дискретизация оператора переноса
  - Используется полностью неявный алгоритм продвижения по времени
- Разработанный метод решения кинетического уравнения **впервые применим** для решения не только академических, но и промышленных задач со сложной геометрией.

# Общая структура численного метода [Титарев, 2010, Titarev, 2012a]

- Вводим ограниченную расчетную область и неструктурированную сетку из ячеек  $V_i$  в физическом пространстве и узлов  $\xi_j$  в скоростном
- Функции  $f$ ,  $f^{(S)}$  будем задавать в центрах ячеек скоростной и физической сеток, интерпретируя их для каждой ячейки  $V_i$  физического пространства как векторы длины  $N_\xi$  с компонентами

$$f_{ij} = f(t, \mathbf{x}_i, \xi_j), \quad f_{ij}^{(S)} = f^{(S)}(t, \mathbf{x}_i, \xi_j), \quad \xi_j = (\xi_{1j}, \xi_{2j}, \xi_{3j})$$

- Интегрирование по ячейке  $V_i$  и стандартная аппроксимация интегралов от потоков и правой части приводит к полу-дискретной схеме

$$\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial t} = \mathbf{R}_i = -\frac{1}{|V_i|} \sum_{l=1} \Phi_{li} + \mathbf{J}_i, \quad \Phi_{li} = \int_{A_{li}} (\xi_{nli} \circ \mathbf{f}) dS,$$

$$\Xi_k = (\xi_{k1}, \xi_{k2}, \xi_{k3}, \dots, \xi_{kN_\xi})^T, \quad \xi_{nli} = n_{1l}\Xi_1 + n_{2l}\Xi_2 + n_{3l}\Xi_3.$$

- Через  $\circ$  обозначена операция покомпонентного умножения двух векторов:  $c = a \circ b$  – вектор с компонентами  $c_i = a_i b_i$ .
- Получившийся метод можно интерпретировать как полудискретную схему решения системы большого числа линейных уравнений сохранения, связанных через нелинейный жесткий источник.

# Аппроксимация оператора переноса

- Для нахождения численных потоков требуются значения  $\mathbf{f}$  на гранях ячеек
- Общая формула для вычисления  $\mathbf{f}_{li}$  на грани  $l$  ячейки  $i$  интерполяцией на границу изнутри ячейки

$$\mathbf{f}_{li} = \mathbf{f}_i + \mathbf{f}_{li}^{\text{поправка}}$$

- **Пространственный метод произвольного порядка:**  $\mathbf{f}_{li}$  выражаются с помощью метода наименьших квадратов через средние значения в ячейках шаблона реконструкции  $V_{m_i}$  в локальной системе координат [Dumbser et al., 2007, Titarev et al., 2010, Титарев, 2010, Tsoutsanis et al., 2010] по формуле

$$\mathbf{f}_{li}^{\text{поправка}} = \psi_i^{3d} \cdot \left( \sum_{m=0}^M \omega_{iml} \mathbf{f}_{m_i} - \mathbf{f}_i \right).$$

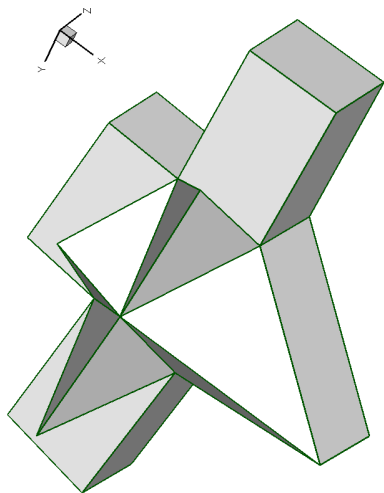
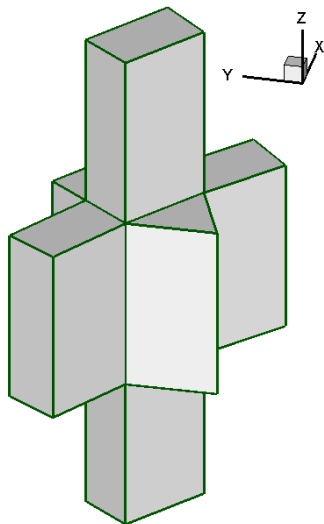
- **Локально-одномерный метод для гексаэдров:**  $\mathbf{f}_{li}$  находятся одномерной интерполяцией в направлении нормали к грани:

$$\mathbf{f}_{li}^{\text{поправка}} = \psi_{li}^{1d} (\mathbf{S}_L, \mathbf{S}_R) \Delta_l,$$

где  $\Delta_l$  – расстояние от центра ячейки  $i$  до центра грани  $l$ ;  $\mathbf{S}_L$  и  $\mathbf{S}_R$  – левая и правая оценки наклона решения.

- В обоих случаях функция  $\psi$  – т.н. ограничитель наклонов

# Шаблоны реконструкции на произвольных сетках



# Консервативность схемы по правой части

- Вернемся к полу-дискретной разностной схеме

$$\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial t} = \mathbf{R}_i = -\frac{1}{|V_i|} \sum_{l=1} \Phi_{li} + \mathbf{J}_i.$$

- Прямая аппроксимация макропараметров с помощью квадратуры 2го порядка ( $\omega_j$  – объем ячейки  $j$  в пространстве скоростей):

$$(\mathbf{U}, \mathbf{q}) = \left( n, n\mathbf{u}, \frac{3}{2}nT + n\mathbf{u}^2, \mathbf{q} \right) = \sum_{j=1}^{N_\xi} \left( 1, \xi_j, \xi_j^2, \frac{1}{2}\mathbf{v}_j v_j^2 \right) f_j \omega_j.$$

- Дискретный аналог уравнений сохранения массы, импульса и энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + D_h(\mathbf{P}) = \delta_{\text{Kn}}, \quad \delta_{\text{Kn}} = \sum_{j=1}^{N_\xi} (1, \xi_j, \xi_j^2)^T J_j \omega_j.$$

- В идеальном случае (точное интегрирование) схема консервативна  $\delta_{\text{Kn}} \equiv \mathbf{0}$ .
- Однако прямая аппроксимация для  $\mathbf{U}$  приводит к неконсервативной схеме:

$$|\delta_{\text{Kn}}| \approx \frac{1}{\text{Kn}} O(\Delta \xi^2).$$

- Основная идея - находить параметры правой части из условий вывода приближенного интеграла столкновений. Вектор переменных  $\mathbf{W} = (n, u_1, u_2, u_3, T, q_1, q_2, q_3)^T$  находится из системы уравнений

$$\mathbf{H}(\mathbf{W}) = \sum_{j=1}^{N_{\xi}} \begin{pmatrix} 1 \\ \xi_j \\ \xi_j^2 \\ \mathbf{v}_j \mathbf{v}_j^2 \end{pmatrix} (f_j^{(S)} - f_j) \omega_j + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ 2 \text{Pr } \mathbf{q} \end{pmatrix} = \mathbf{0}.$$

Здесь индексы  $i, n$  опущены для простоты. Данная система из 8 уравнений решается методом Ньютона.

- Данный способ нахождения макропараметров применим к любому приближенному интегралу столкновений; протестирован на моделях БГК [Bhatnagar et al., 1954], Шахова [Шахов, 1968], Рыкова [Рыков, 1975].
- В случае  $\text{Pr} = 1$  первые 5 уравнений сводятся к методу [Mieussens, 2000, Gusarov and Smurov, 2002], полученному из других соображений.
- Для значительного ускорения вычислений предложена приближенная формула для якобиана, как функции макроскопических переменных, а не интегральных сум по  $\xi$ , см. [Титарев, 2010].

- Зеркальное отражение от плоскости симметрии:
  - скоростная сетка строится таким образом, чтобы обеспечить попадание вектора скорости отраженной молекулы  $\xi_1 = \xi - 2\xi_n \mathbf{n}$  в узел сетки
  - после этого расчет г.у. тривиален  $f(t, \mathbf{x}, \xi) = f(t, \mathbf{x}, \xi_1)$
- Граничное условие диффузного отражения с полной тепловой аккомодацией к заданной температуре:

- плотность отраженных молекул  $n_w$  на каждом шаге по времени

$$n_w = -\frac{N_i}{N_r}, \quad N_i = \sum_{\xi_n < 0} (\xi_n f)_j \omega_j \xi, \quad N_r = \frac{1}{(\pi T_w)^{3/2}} \sum_{\xi_n \geq 0} \left[ \xi_n \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right) \right]_j \omega_j$$

- этим обеспечивается точное выполнение условия непротекания

$$\sum_{\xi_n \geq 0} [\xi_n f_w]_j \omega_j + \sum_{\xi_n < 0} [\xi_n f]_j \omega_j \equiv 0$$

- обобщение на случай равновесной температуры поверхности требует итераций
- Численная реализация граничных условий сохраняет консервативность метода по правой части



# Продвижение по времени [Titarev, 2010, Титарев, 2010, Titarev, 2012b, Titarev, 2012a]

- Используем неявный метод Эйлера по времени:

$$\frac{\Delta f_i}{\Delta t} = R_i^{n+1}, \quad \Delta f_i = f_i^{n+1} - f_i^n, \quad \rightarrow \frac{\Delta f_i}{\Delta t} = R_i^n + \left( \frac{\partial R}{\partial f} \right) \Delta f_i.$$

- Приближенная линейризация потоков и источника дает следующие выражения:

$$\Phi_{li}^{n+1} \approx \Phi_{li}^n + \frac{\partial \Phi_{li}^n}{\partial f_i^n} \circ \Delta f_i + \frac{\partial \Phi_{li}^n}{\partial f_{ij}^n} \circ \Delta f_{ij}, \quad J_i^{n+1} \approx J_i^n - \nu_i^n \Delta f_i.$$

- Перегруппировывая члены, получаем в компактной векторной записи

$$d_i \circ \Delta f_i + \sum_j c_{ij} \circ \Delta f_{ij} = R_i^n.$$

- Система решается в два этапа на основе LU-SGS подхода, предложенного в [Men'shov and Nakamura, 1995].
- Хранение матрицы системы в памяти не требуется. Тестовые расчеты показывают, что решение системы увеличивает затраты на 30% по сравнению с явной схемой Колгана первого порядка по времени.

- На основе предложенного численного метода были разработаны два параллельных программных комплекса решения кинетического уравнения
- Язык программирования - Fortran 2003 с элементами ООП.
- Пакет программ “**Несветай-2Д**” для решения плоских задач
  - двумерные расчетные сетки из треугольников и и четырехугольников
  - структурированная одноблочная скоростная сетка
  - одноуровневая модель параллельных вычислений
  - свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2017616495 от 07.06.2017
- Пакет программ “**Несветай-3Д**” для решения плоских, осесимметричных и трехмерных задач
  - состоит из вычислительного ядра (базовой библиотеки), непосредственно кинетического решателя и препроцессора.
  - поддерживаются одноуровневые (MPI, OpenMP) и двухуровневая OpenMP + MPI модели параллельных вычислений
  - свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2017616295 от 06.06.2017
- Далее в докладе будем использовать только пакет “**Несветай-3Д**”

## *Препроцессор пространственной сетки (4 модуля)*

- Разбиение сетки на блоки
- Перенумеровка вершин, граней и ячеек
- Специальный формат сеток

## *Препроцессор скоростной сетки (3 модуля)*

- Чтение сетки в форматах Neutral и StarCD 3.2.0
- Учет плоскостей симметрии
- Вывод сетки и квадратурных весов

## *Вычислительное ядро (11 модулей)*

- Чтение сетки в форматах Neutral и StarCD 3.2.0
- Структуры вершина, ячейка, грань, сетка, поверхностная сетка
- Чтение сетки в форматах Neutral & StarCD, построение графов связности
- Процедуры реконструкции функций
- Процедуры для использования MPI и OpenMP

## *Кинетический решатель (21 модуль)*

- Модели Крука и Шахова для одноатомного газа
- Дискретизация по времени методом LU-SGS
- Интегрирование по молекулярной скорости с консервативными коррекциями
- Решатели для конкретных классов течений: микроканал, внешнее обтекание, испарение
- Параллельный ввод/вывод с использованием MPI 2.0
- Процедуры обработки данных

- 1 Одноуровневая модель [Titarev, 2012a, Titarev et al., 2014a] - MPI-обмены между узлами и декомпозиция сетки одним из двух способов:
  - В пространстве скоростей препроцессором комплекса “Несветай-3Д” с учетом граничных условий зеркального отражения.
  - В физическом пространстве с помощью внешней программы (например Metis) и подготовка блоков препроцессором комплекса “Несветай-3Д”
- 2 **Двухуровневая модель параллельных вычислений** OpenMP + MPI [Титарев, 2015, Титарев et al., 2016] для современных multi- и many-core систем:
  - Верхний уровень – MPI-обмены между узлами
  - Нижний уровень – декомпозиция физической сетки каждого MPI-процесса на блоки и использование технологии OpenMP для всех этапов численного алгоритма.
  - В многопоточной реализации метода LU-SGS каждая нить работает для своей части пространственной сетки; при этом для “фиктивных” ячеек используется приближение Якоби  $\Delta \mathbf{f}_i = \mathbf{R}_i / d_i$ , где  $d_i$  - диагональный элемент матрицы неявного метода
- 3 Пример: расчет на системе Петастрим (СПбГПУ им. Петра Великого)
  - одноуровневая MPI модель: 61440 MPI процессов (по числу гиперпотокков)
  - двухуровневая OpenMP + MPI модель: 256 MPI процессов (по числу узлов системы); каждый процесс запускает 240 OpenMP нитей.

# Блок-схема алгоритма для MPI-разбиения по скорости



## Глава 4: течения в микроканалах

- Исследование течений разреженных газов в каналах и трубах важно для различных MEMS [Ho and Tai, 1998], таких как микронасосы и микротурбины, микросопла, системы охлаждения электронных компонентов.
- К настоящему времени достаточно полно разработаны методы расчета течений в трубах и каналах бесконечной длины и сечения простой формы на основе линеаризованных кинетических моделей.
- Наибольший интерес представляет анализ нелинейной задаче о течении газа в канале конечной длины с учетом входного и выходного резервуаров. С точки зрения вычислительной физики, такая постановка задачи является **наиболее сложной**.
- Большинство расчетов для каналов конечной длины относится к случаю коротких каналов постоянного круглого сечения; расчеты проводились методом ПСМ для большого перепада давлений. С увеличением относительной длины трубы, либо уменьшения перепада давлений **проблема усложняется** и требует все больших и больших затрат счетного времени.
- Как и следовало ожидать, метод Монте-Карло в классическом его варианте неэффективен для решения подобного рода задач.
- В настоящей работе задача решается с помощью кинетического уравнения.

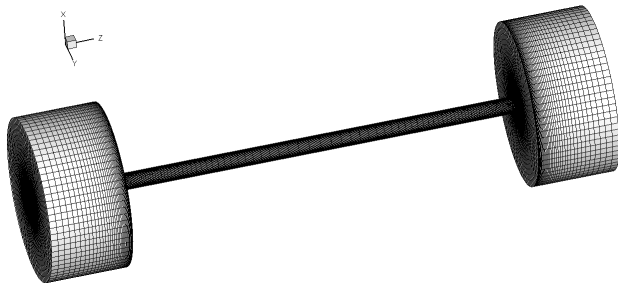
- 1 Комплексом “Несветай-2Д” решена задача о течении газа в канале бесконечной длины и произвольной формы;
  - реализованный метод решения в 100-1000 раз быстрее имеющихся в литературе [Sharipov and Graur, 2013]
  - продемонстрирован второй порядок сходимости по сетке
- 2 Комплексом “Несветай-3Д” на системах “Чебышёв” и “Ломоносов” НИВЦ МГУ [Воеводин et al., 2012] решена серия задач о течении газа через трубу большой конечной длины:
  - Относительная длина трубы  $L/R = 10, 20, 50$ ; сетка  $\approx 0.5 \dots 2 \times 10^9$  узлов; время счета от 3 до 14 дней с использованием 256 ядер
  - Учитывались концевые эффекты - расчетная область включала в себя резервуары высокого и низкого давления
  - Для случая малого перепада давлений
    - решалось линеаризованное кинетическое уравнение для круглого сечения трубы
    - проведено сравнение с предельными решениями  $Kn \rightarrow \infty$  и  $L/R \rightarrow \infty$
  - Для случая истечения в вакуум
    - форма сечения трубы – произвольная
    - проведено сравнение с предельными решениями  $L/R \rightarrow \infty$  и методом плоских сечений
- 3 Далее в результатах число Кнудсена (или параметр разреженности) рассчитаны по параметрам газа в резервуаре высокого давления и радиусу входного сечения

# Постановка задачи и сеточная модель

- Газ течет из левого резервуара высокого давления в правый резервуар низкого давления; боковые стенки поддерживаются при постоянной температуре  $T_w$
- Основная расчетная величина – безразмерный расход массы  $\dot{M}$  через входное сечение. Принято использовать нормированные расходы массы  $Q$  &  $M_p$ :

$$Q = \dot{M} / \dot{M}_0^{\text{отв}}, \quad \dot{M}_0^{\text{отв}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} |A|, \quad M_p = \frac{2}{|A|} \frac{1}{K_p} \dot{M}, \quad K_p = \frac{p_1 - p_2}{L}.$$

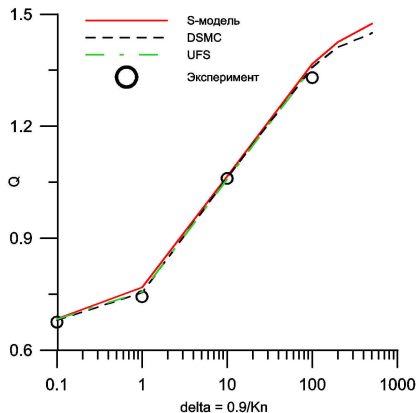
- На рисунке иллюстрируется геометрия задачи для круглой трубы с соотношением длины к радиусу  $L/a = 50$



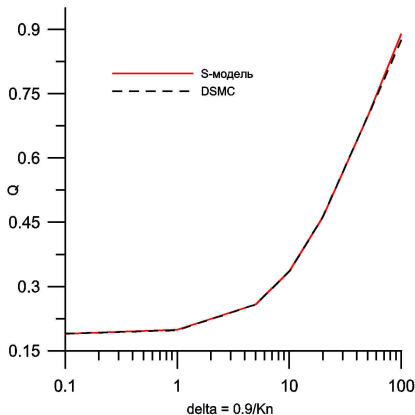


# Верификация и валидация при истечении в вакуум

Расход массы  $Q$  через круглую трубу в зависимости от относительной длины трубы  $L/R$  и параметра разреженности  $\delta = 0.9/Kn$ .



(a)  $L/R = 1$ , [Titarev and Shakhov, 2012, Titarev et al., 2014a, Aristov et al., 2014]

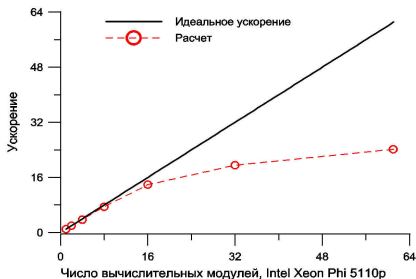
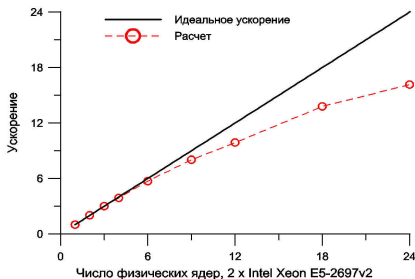


(б)  $L/R = 10$ , [Titarev and Shakhov, 2012]

Для расчета по S-модели получен **порядок сходимости**  $\approx 1.6$

# Масштабируемость на системе с общей памятью

- Решается задача для круглой трубы, сетка  $\approx 545$  миллионов узлов



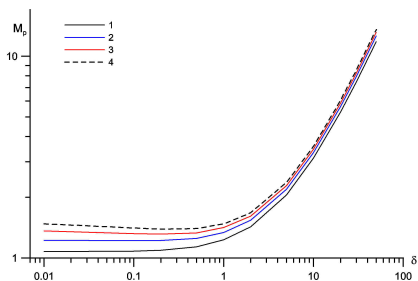
- При использовании неявной ТВД схемы получено ускорение
  - $\approx 16$  раз на узле с двумя процессорами Xeon E5-2697v2 (в сумме  $2 \times 12 = 24$  физических ядра)
  - $\approx 96$  раз на 244 гиперпотоках на ускорителе Intel Xeon Phi 5110p (61 четырехпоточных вычислительных модулей, всего 244 гиперпотоков)
- Полученные результаты находятся на уровне лучших примеров из вычислительной аэродинамики.

# Прямая круглая труба, малый перепад давлений [Titarev, 2013]

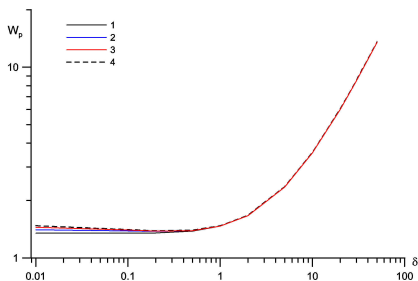
- В [Шахов, 1999, Шахов, 2000] показано, что для достаточно длинных труб течение в срединной части приближается к асимптотическому решению.
- Введем расход массы, нормированный на градиент давления в центре

$$W_p = -(1/d\hat{p}/dx)\dot{M}.$$

- Кривые 1–4 относятся к  $L/R = 10, 20, 50$  и  $\infty$



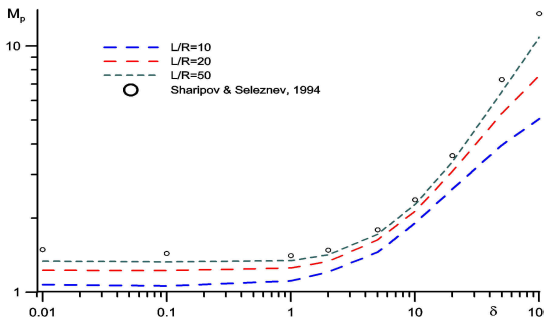
(а) Сравнение по  $M_p$



(б) Сравнение по  $W_p$

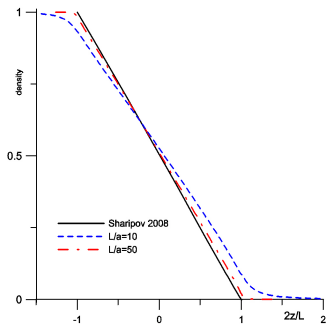
# Истечение в вакуум [Titarev and Shakhov, 2012]

- Представлена зависимость нормированного расхода  $M_p$  от длины  $L/R$  и параметра разреженности  $\delta$ ;
- С ростом  $L/R$  для умеренных  $\delta$  расход массы приближается к решению  $L/R = \infty$  (методу плоских сечений).
- Однако для свободно-молекулярного режима  $\delta \ll 1$  и для переходного режима  $\delta \geq 50$  сходимость по  $L/R$  очень медленная.
- Кнудсеновский минимум слабо выражен для  $L/R = 20, 50$  и не существует для более коротких труб, что согласуется с данными других авторов.

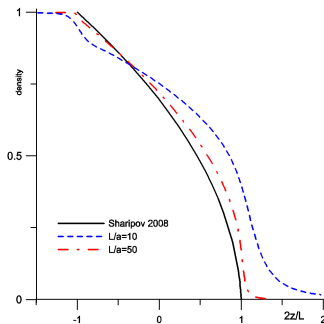


# Плотность вдоль оси [Титарев and Шахов, 2013]

- Для  $L/R = 50$  наблюдается хорошее согласие с одномерной теорией для  $\delta = 1$  везде, кроме небольших участков вблизи концов трубы.
- С ростом  $\delta$  расчетная кривая становится существенно нелинейной и отходит от одномерного решения.
- Показано, что обычное условие  $L/R \gg 1$  недостаточно для применимости одномерной теории; следует дополнительно потребовать  $\text{Kn} \cdot L \gg 1$ .



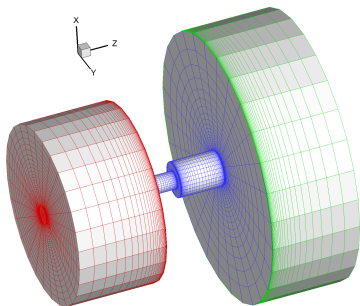
(а) Режим  $\delta = 1$



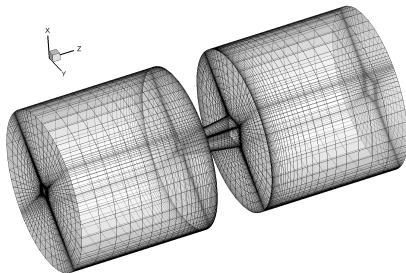
(б) Режим  $\delta = 100$

# Моделирование течений в трубах переменного сечения

- Моделировалось течение через трубы переменного круглого сечения (коническая труба [Titarev et al., 2014b], составная труба [Titarev and Shakhov, 2014]), а также через трубу прямоугольного сечения [Титарев et al., 2013].
- Наиболее интересные результаты получены для случая круглой трубы, состоящей из двух частей одинаковой длины постоянного радиуса [Titarev and Shakhov, 2014]; при этом отношение радиусов частей равно 2.



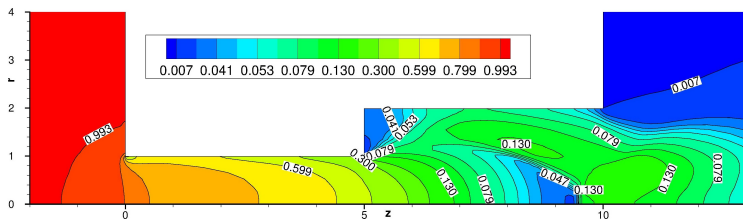
(а) Составная круглая труба



(б) Труба прямоугольного сечения

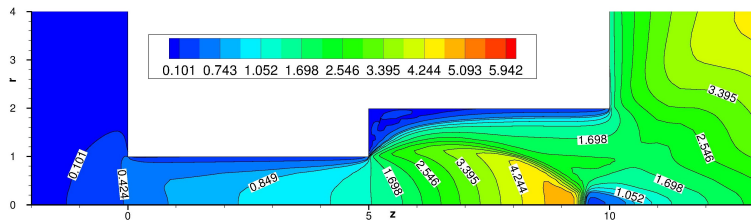
# Течение в составной трубе [Titarev and Shakhov, 2014]

- Интересной особенностью течения в такой трубе является формирование при  $\delta \gg 1$  во второй секции диска Маха и зоны возвратного течения.
- В области расширяющегося течения газа на оси трубы макроскопические величины следуют по универсальной кривой, слабо зависящей от  $\delta$ .
- При этом в течении присутствует волна разрежения Прандтля-Майера, которая отражается от второй части трубы вниз по течению.
- С ростом значения параметра разреженности (уменьшения числа Кнудсена) структура ударной волны становится более выраженной и позиция маховского диска устанавливается около  $z \approx 9$ .

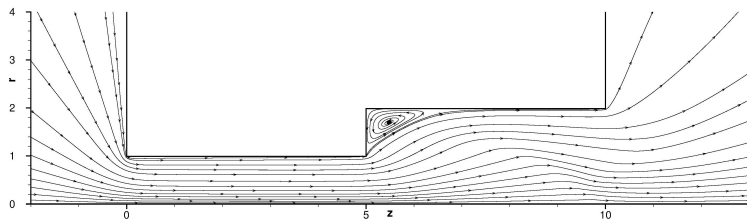


(а) Числовая плотность для  $\delta = 1000$  и  $L/a = 10$

# Течение в составной трубе (2)



(а) Число Маха для  $\delta = 1000$  и  $L/a = 10$



(б) Линии тока для  $\delta = 1000$  и  $L/a = 10$



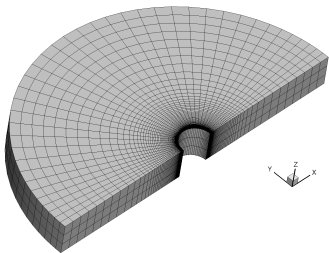
При численном моделировании гиперзвуковых течений на основе модельных кинетических уравнений существует 2 фундаментальные проблемы:

1. Применимость модельного интеграла столкновений (валидация)
  - Как известно, построение модельного интеграла столкновений нацелено на правильный выход на режим сплошной среды в пределе  $Kn \rightarrow 0$  ( $\delta \rightarrow \infty$ ).
  - Реальная точность моделирования при  $Kn \approx 1$  может оцениваться путем сравнения с результатами, полученными по точному уравнению Больцмана или решению ПСМ
  - Систематических сравнений для  $M_\infty \gg 1$  не приводилось
2. Быстрый рост вычислительных затрат при  $M_\infty \gg 1$ 
  - При использовании традиционной прямоугольной сетки в скоростном пространстве число узлов растет как  $M_\infty^3 \Rightarrow$  расчет пространственных течений при  $M_\infty > 20$  становится невозможным
  - В литературе предлагается использовать сетку типа восьмеричного дерева, см. например [Arslanbekov et al., 2013, Baranger et al., 2014].
3. В настоящей работе решены обе эти проблемы.

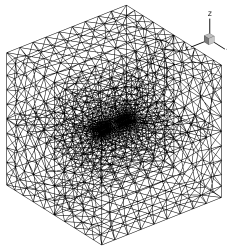
- 1 Предложен и реализован в параллельном пакете программ “Несветай-3Д” новый метод построения скоростной сетки для  $M_\infty \gg 1$  [Titarev, 2017b]
  - размер сетки слабо зависит от числа Маха набегающего потока: переход от  $M_\infty = 10$  к  $M_\infty = 30$  всего лишь удваивает число узлов
- 2 Проведена серия верификационных расчетов для задачи обтекания круглого цилиндра радиуса 15.24 см [Titarev, 2017b, Titarev, 2017a]
  - $M_\infty = 10, 25, 0.0225 \leq Kn \leq 1.6$ , газы аргон и азот
  - показано хорошее согласие с методом ПСМ по коэффициентам  $c_p, c_f, c_h$  для обоих газов и для поля течения аргона
- 3 На системах “Ломоносов” НИВЦ МГУ [Воеводин et al., 2012] и “РСК Петастрим” [Semin et al., 2014] МСЦ РАН и СПбГПУ Петра Великого проведена серия оценочных расчетов обтекания различных трехмерных тел сложной формы
  - Высота полета 90...100 км, скорость полета 7900 м/с, угол атаки 25 градусов
  - Геометрии: воздушно-космический аппарат (ВКА) ЦАГИ и сегментально-коническое тело
  - Расчетные сетки: (а) многоблочные структурированные (б) типа тетра-призм
  - Показана хорошая масштабируемость программного комплекса при использовании 256 узлов кластера “Политехник - РСК Петастрим”(61440 гиперпоток) [Titarev, 2017a]
- 4 Таким образом, впервые показана применимость кинетических уравнений для численного моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа.

# Валидация модели и верификация кода [Titarev, 2017b, Titarev, 2017a]

- Рассматривается задача обтекания круглого цилиндра радиуса 6 дюймов (15.24 см) для чисел Маха  $M_\infty = 10, 25$
- Результаты сравниваются с расчетами по DSMC коду “Monaco” [Dietrich and Boyd, 1996], приведенными в [Lofthouse, 2008].
- Представлены результаты использованием наиболее подробной сетки из  $115 \times 40$  ячеек в плоскости x-y и скоростной сетки из 35720 узлов.



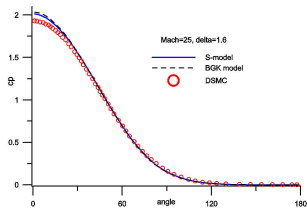
(a) Пространственная сетка



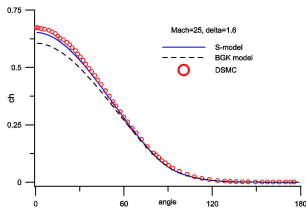
(б) Скоростная сетка

# Обтекание потоком аргона, $M_\infty = 25$ , $\mu = T^{0.734}$

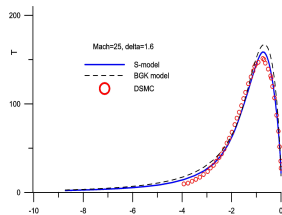
$\delta = 1.6$  ( $\text{Kn} \approx 0.56$ )



(a) коэф. давления  $c_p$

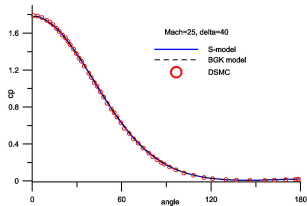


(б) коэф. теплоотдачи  $c_h$

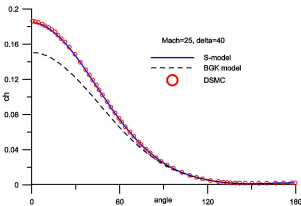


(в) температура  $T$

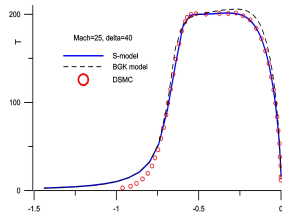
$\delta = 40$  ( $\text{Kn} \approx 0.0225$ )



(a) коэф. давления  $c_p$



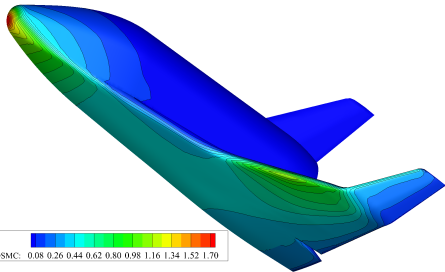
(б) коэф. теплоотдачи  $c_h$



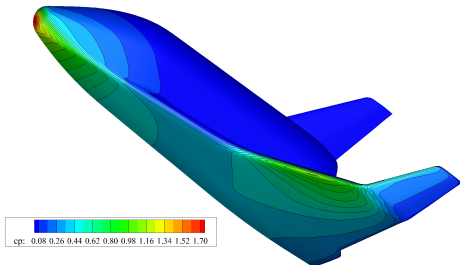
(в) температура  $T$

# Верификация на модели ВКА ЦАГИ

- Сравнение с результатами метода ПСМ, код SMILE [Ivanov et al., 2007]
- Расчеты кодом SMILE проводились сотрудниками ИТПМ СО РАН Е.А. Бондарем, П.В. Ващенко и А.А. Шевыриным в рамках проекта РФФИ 15-07-02986
- Высота  $H = 90$  км, одноатомный газ,  $\delta = 38/\text{м}$ ,  $\mu = T^{0.734}$
- Число Маха набегающего потока  $M_\infty = 10$ , угол атаки  $\alpha = 25$
- Представлены линии уровня коэффициента давления  $c_p$

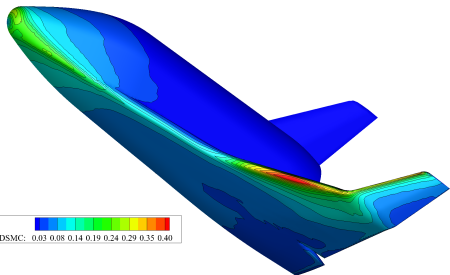


(а) код SMILE

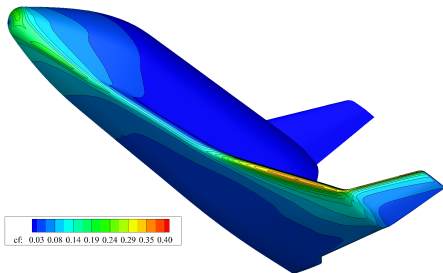


(б) Несветай-3Д

Сравнение распределений коэффициента трения  $c_f$ :

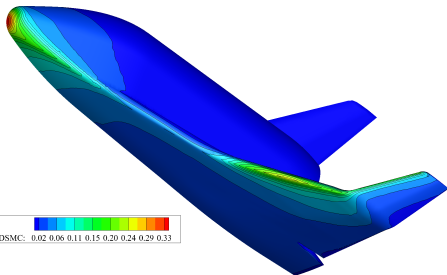


(a) код SMILE

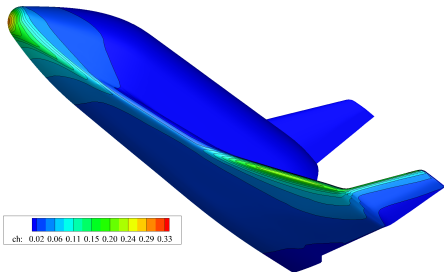


(б) Несветай-3Д

Сравнение распределений коэффициента теплоотдачи  $c_h$ :



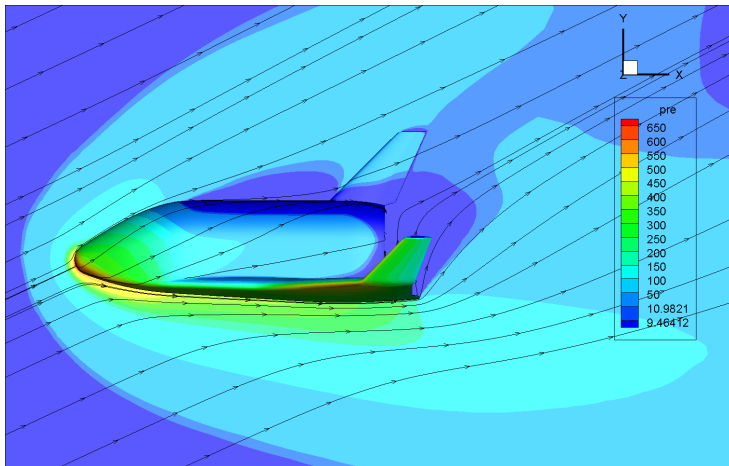
(a) код SMILE



(б) Несветай-3Д

# Оценочный расчет для первой космической скорости

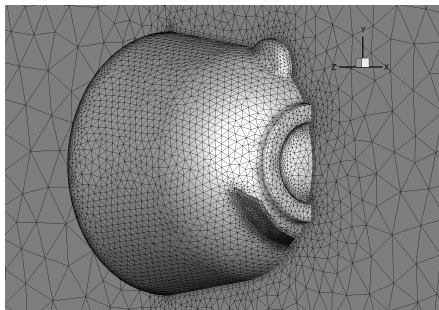
- Высота 100 км, газ – воздух,  $\delta = 0.71/\text{м}$ ,  $U_\infty = 7900 \text{ м/с}$ ,  $\alpha = 25^\circ$
- Полное число ячеек в 6-мерном пространстве – **19,7 миллиардов!**



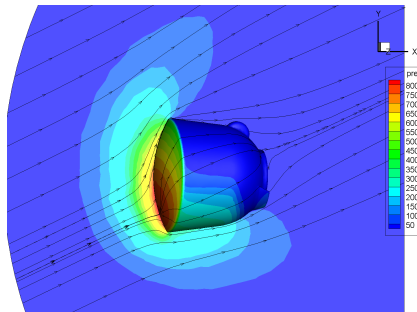


# Обтекание сегментально-затупленного тела

- Трехмерное тело сложной формы с надстройками
- Параметры задачи такие же, как и в расчете обтекания ВКА:
  - высота полета 100 км
  - скорость набегающего потока 7900 м/с, угол атаки  $\alpha = 25$ .
- Сетка в физическом пространстве - типа тетра-призм, 326 тысяч ячеек.
- Полное число ячеек в 6-мерной сетке - 14,7 миллиардов.



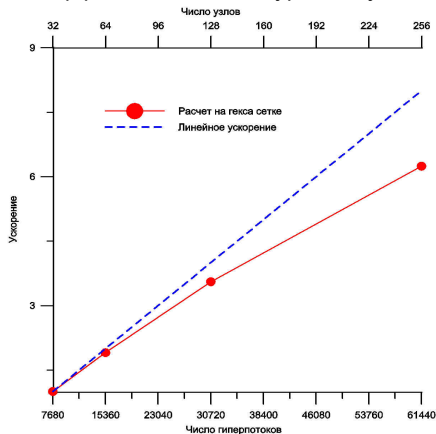
(а) Расчетная сетка



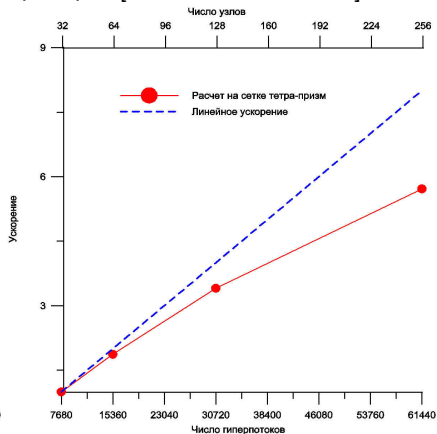
(б) Давление и линии тока

# Масштабируемость кода на Петастрим СПбГПУ Петра Великого [Titarev, 2017a]

- Режим обтекания:  $U_\infty = 1500$  м/с, высота 100 км
- Эффективность – на уровне лучших примеров [Абалакин et al., 2012].



(а) гексы, 9.5 миллиарда узлов



(б) тетра-призм, 8.7 миллиарда узлов

- Разработана новая методология численного моделирования сложных трехмерных задач механики разреженного газа на основе решения кинетических уравнения на суперЭВМ.
- Разработан новый неявный численный метод решения модельного кинетического уравнения, позволяющий моделировать течения разреженного газа на общих неструктурированных сетках для произвольных режимов обтекания. Применение метода к задаче гиперзвукового обтекания тел обеспечивает ускорение счета до 1000 раз по сравнению с общепринятыми схемами решения кинетических уравнений.
- Создан комплекс параллельных программ “**Несветай-3Д**”, позволивший эффективно построить решение трехмерного кинетического уравнения на современных суперЭВМ с использованием рекордного числа процессоров / гиперпотоков (более 60000).

- Построено решение задачи о стационарном течении разреженного газа через канал произвольной конечной длины и сложной формы. Уточнены границы применимости приближения плоских сечений, как для расхода массы, так и для распределения параметров по оси симметрии. Для составной трубы показано формирование диска Маха при достаточно малых числах Кнудсена.
- Впервые проведена количественная оценка точности моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа на основе численного решения модельного кинетического уравнения. Показано, что при больших числах Маха около тела возникают параметры течения, которые соответствуют условию применимости S-модели.
- Впервые построено решение кинетического уравнения для задачи обтекания реалистичных моделей спускаемого аппарата для режима обтекания, соответствующего входу спускаемого аппарата в атмосферу с первой космической скоростью. Для расчетов использовались шестимерные пространственные сетки с общим числом узлов до 18 миллиардов.

- 1 V.A. Titarev. Conservative numerical methods for model kinetic equations. *Computers & Fluids*, 36(9):1446 – 1459, 2007.
- 2 M. Dumbser, M. Käser, V.A. Titarev, and E.F. Toro. Quadrature-free non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for nonlinear hyperbolic systems. *J. Comput. Phys.*, 226:204–243, 2007.
- 3 В.А. Титарев. Численный метод расчета двухмерных нестационарных течений разреженного газа в областях произвольной формы. *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 49(7):1255–1270, 2009.
- 4 В.А. Титарев и Е.М. Шахов. Консервативный метод высокого порядка для расчета течения Пуазейля разреженного газа в канале произвольного поперечного сечения. *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 50(3):563–574, 2010.
- 5 V.A. Titarev. Implicit unstructured-mesh method for calculating Poiseuille flows of rarefied gas. *Commun. Comput. Phys.*, 8(2):427–444, 2010.
- 6 V.A. Titarev, P. Tsoutsanis, and D. Drikakis. WENO schemes for mixed-element unstructured meshes. *Commun. Comput. Phys.*, 8(3):585–609, 2010.

# Список журнальных публикаций II

- 7 В.А. Титарев. Неявный численный метод расчета пространственных течений разреженного газа на неструктурированных сетках. *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 50(10):1811–1826, 2010.
- 8 В.А. Титарев и Е.М. Шахов. Неизотермическое течение газа в длинном канале на основе кинетической S-модели. *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 50(12):2246–2260, 2010.
- 9 P. Tsoutsanis, V.A. Titarev, and D. Drikakis. WENO schemes on arbitrary mixed-element unstructured meshes in three space dimensions. *J. Comput. Phys.*, 230:1585 – 1601, 2010.
- 10 V.A. Titarev and D. Drikakis. Uniformly high-order schemes on arbitrary unstructured meshes for advection-diffusion equations. *Computers & Fluids*, 46(1):467–471, 2011 (10th ICFD Conference Series on Numerical Methods for Fluid Dynamics).
- 11 V.A. Titarev. Implicit high-order method for calculating rarefied gas flow in a planar microchannel. *J. Comput. Phys.*, 231(1):109–134, 2012.

## Список журнальных публикаций III

- 12 V.A. Titarev. Efficient deterministic modelling of three-dimensional rarefied gas flows. *Commun. Comput. Phys.*, 12(1):161–192, 2012.
- 13 V.A. Titarev and E.M. Shakhov. Computational study of a rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum. *Vacuum, Special Issue "Vacuum Gas Dynamics: Theory, experiments and practical applications"*, 86(11):1709–1716, 2012.
- 14 М. Думбсер, В.А. Титарев, and С.В. Утюжников. Неявный многоблочный метод решения кинетического уравнения на неструктурированных сетках. *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 53(5):762–782, 2013.
- 15 В.А. Титарев and Е.М. Шахов. Концевые эффекты при истечении разреженного газа через длинную трубу в вакуум. *Известия РАН. Механика жидкости и газа*, (5):146–158, 2013.
- 16 V.A. Titarev. Rarefied gas flow in a circular pipe of finite length. *Vacuum*, 94:92–103, 2013.

- 17 В.А. Титарев, С.В. Утюжников, Е.М. Шахов. Истечение разреженного газа в вакуум через трубу квадратного сечения, переменного по длине. *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 53(8):1402 – 1411, 2013.
- 18 V.V. Aristov, E.M. Shakhov, V.A. Titarev, and S.A. Zabelok. Comparative study for rarefied gas flow into vacuum through a short circular pipe. *Vacuum*. 103:5–8, 2014.
- 19 V.A. Titarev, E.M. Shakhov, and S.V. Utyuzhnikov. Rarefied gas flow through a diverging conical pipe into vacuum. *Vacuum*, 101:10–17, 2014.
- 20 V.A. Titarev, M. Dumbser, and S.V. Utyuzhnikov. Construction and comparison of parallel implicit kinetic solvers in three spatial dimensions. *J. Comput. Phys.*, 256:17–33, 2014.
- 21 V.A. Titarev and E.M. Shakhov. Rarefied gas flow into vacuum through a pipe composed of two circular sections of different radii. *Vacuum. SI "Advances in Vacuum Gas Dynamics"*, 109:236–245, 2014.



- 22 В.А. Титарев. Программный комплекс Несветай-3Д моделирования пространственных течений одноатомного разреженного газа. *Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Элект. журнал*, (6):124–154, 2014.
- 23 В.А. Титарев, А.В. Чикиткин, С.В. Утюжников. OpenMP+MPI параллельная реализация численного метода для решения кинетического уравнения. *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 56(11):1949–1959, 2016.
- 24 V.A. Titarev. Numerical modeling of high-speed rarefied gas flows over blunt bodies using model kinetic equations. *European Journal of Mechanics / B Fluids, Special Issue on Non-equilibrium Gas Flows*, 64:112–117, 2017.
- 25 V.A. Titarev. Application of model kinetic equations to hypersonic rarefied gas flows. *Computers & Fluids, Special issue "Nonlinear flow and transport"*, 2017, DOI 10.1016/j.compfluid.2017.06.019.
- 26 D. Valougeorgis, N. Vasileiadis, and V. Titarev. Validity range of linear kinetic modeling in rarefied pressure driven single gas flows through circular capillaries. *European Journal of Mechanics / B Fluids, Special Issue on Non-equilibrium Gas Flows*, 64:2–7, 2017.

