Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого Физико-механический институт

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О МОНОПОЛЕ МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

Забелло К.К., Гарбарук А.В.

CFD Weekend-2025, 29–30 ноября 2023

Введение

- **Метод решёточных уравнений Больцмана (LBM)** является развитием моделей решеточного газа (Lattice Gas Models, LGM).
  - LBM описывает поведение среды путем моделирования процессов переноса и столкновений
    - Решаются модельные кинетические уравнения

Достоинства LBM:

- Высокая скорость счета
- Явная схема
- Строгое разделение нелокальных и нелинейных слагаемых

- Высокая масштабируемость и параллелизуемость.
- Расчеты на супер компьютерном кластере JUQUEEN демонстрируют линейное ускорение вплоть до 2 млн процессов на сетке в 886 млрд узлов, с скоростью близкой к **1 трлн узлов в секунду** [1].

[1] Schornbaum F., Rüde U. Massively Parallel Algorithms for the Lattice Boltzmann Method on NonUniform Grids // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2016.

- В СПбПУ разрабатывается код, реализующий метод LBM

Цель работы:

• Исследование возможностей метода LBM для описания распространения акустических возмущений на примере канонической задачи о распространении тонального сигнала в неограниченном пространстве.

Разрабатываемый код

- Язык C++;
- Структура данных: Struct of Arrays + структурированная сетка;
- Вывод данных с использованием библиотеки VTK;
- Средства разработки: VS2022 + Git + CMake
- Имеется две версии кода:

CPU-версия:

- Intel One API (icpx + MPI, неблокирующие обмены)
- Linux (WSL)

GPU-версия:

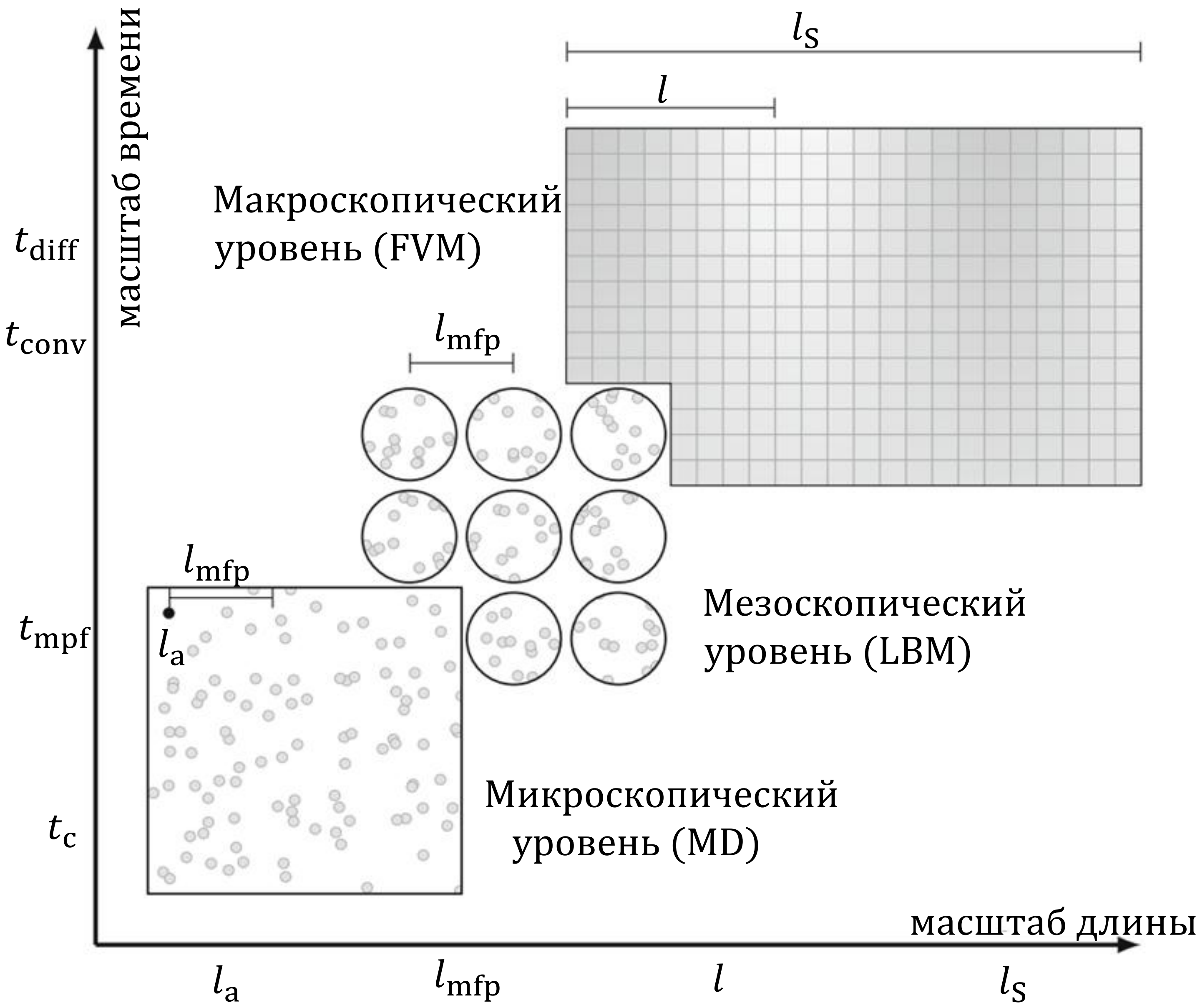
- CUDA Toolkit (CUDA + cl.exe)
- Windows

Сравнение скорости решения на CPU и GPU

Сетка	CPU (i5-9300H, 4 проц.), с	GPU (GeForce GTX 1650), с
1 млн узлов	220	30

Метод решёточных уравнений Больцмана

Метод решёточных уравнений Больцмана



Метод LBM осуществляет приближенное решение уравнения Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \nabla f + \frac{\vec{F}}{\rho} \cdot \nabla_{\xi} f = \Omega$$

где $f(\vec{r}, \vec{\xi}, t)$ - функция распределения частиц, которая в равновесии стремится к распределение Максвелла: $\lim_{t\to\infty} f \to f^{eq}$

$\vec{r}, \vec{\xi}, t$ – переменные пространства координат, скорости и времени

$\vec{F}$ – вектор внешних сил;

$\Omega = -\frac{f - f^{eq}}{\tau}$ – интеграл столкновений в приближении Бхатнагара-Гросса-Крука

τ – время релаксации (параметр);

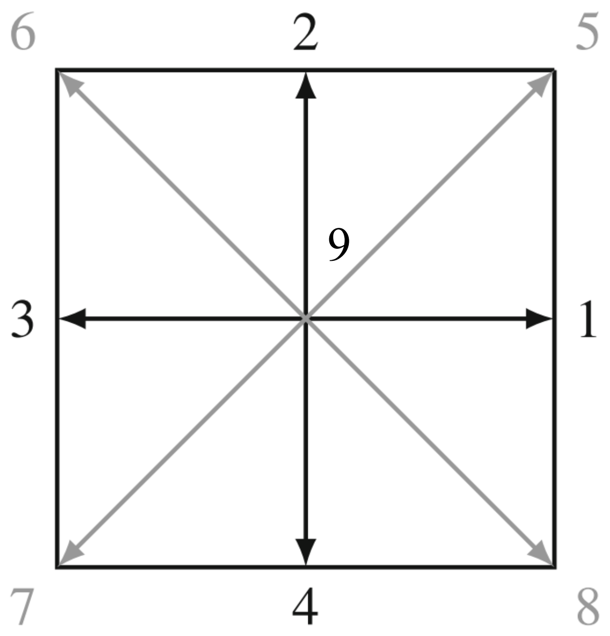
- Макровеличины являются моментами $f(\vec{r}, \vec{\xi}, t)$: $\rho(\vec{r}, t) = \iiint f d^3\vec{\xi}$;

  $\rho\vec{v}(\vec{r}, t) = \iiint \vec{\xi} f d^3\vec{\xi}$ и др;

Дискретизация уравнения Больцмана

Дискретизация проводится в семимерном пространстве $\left(\vec{r}, \vec{\xi}, t\right)$:

- В пространстве скоростей используется разложение по дискретному набору, называемому решеткой $f\left(\vec{r}, \vec{\xi}, t\right) \rightarrow \{f_i(\vec{r}, t); \vec{c}_i\}_{i=1}^{N}, \mathrm{N} = 9$
  - Это разложение получается из разложения по полиномам Эрмита до второго порядка
- В физическом пространстве и по времени проводится дискретизация с постоянными шагами Δx и Δt



D2Q9

В итоге получается решеточное уравнение Больцмана:

$$f_i(\vec{r} + \vec{c}_i\Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{r}, t) - \frac{f_i(\vec{r}, t) - f_i^{eq}(\vec{r}, t)}{\tau}\Delta t$$

На каждом шаге по времени в каждой точке выполняется 2 этапа

Расчет влияния столкновений на функцию распределения в каждом узле

$$f_i^*(\vec{r}, t) = f_i(\vec{r}, t) - \frac{f_i(\vec{r}, t) - f_i^{eq}(\vec{r}, t)}{\tau}\Delta t$$

Перенос функций распределения в соседние узлы

$$f_i(\vec{r} + \vec{c}_i\Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{r}, t)$$

Алгоритм реализации LBM

- Инициализация $(\rho, \vec{v} \to f_i)$
- Итерационный цикл по времени
  - Вычисление моментов $(f_i \to \rho, \vec{v})$
    - $\rho = \sum_i f_i$
    - $\rho\vec{v} = \sum_i \vec{c}_i f_i$
  - Вычисление равновесной функции $\left(\rho, \vec{v} \to f_i^{eq}\right)$
  - Столкновение $\left(f_i, f_i^{eq} \to f_i^*\right)$
    - $f_i^*(\vec{r}, t) = f_i(\vec{r}, t) - \frac{f_i(\vec{r},t) - f_i^{eq}(\vec{r},t)}{\tau} \Delta t$
  - Перенос $(f_i^* \to f_i)$
    - $f_i(\vec{r} + \vec{c_i}\Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{r}, t)$
  - Учет граничных условий $(f_i^* \to f_i)$
- Вывод результатов $(\rho, \vec{v} \to$ диск$)$

Связь решеточных уравнений Больцмана с уравнениями Навье-Стокса

Используя разложение Чепмена-Энскога по малому параметру $\varepsilon = O(Kn)$:

$$f_i = f_i^{eq} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)} + \cdots$$

из решеточного уравнения Больцмана можно перейти к системе уравнений Навье-Стокса:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = q + \boxed{O(\Delta x^2) + O(\Delta t^2)};$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}\vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) + \boxed{O(\Delta x^2) + O(\Delta t^2)} + \boxed{O(|\vec{v}|^3)}$$

Изотермическое уравнение состояния:

$$p = c_s^2 \rho,$$

Дискретизация по времени и пространству

где $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\Delta x}{\Delta t}$ – скорость звука

Коэффициент динамической вязкости:

$$\mu = \rho c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right)$$

Дискретизация в пространстве скоростей

Вязкость и скорость звука зависят от шага по времени и пространству!

Постановка задачи о монополе

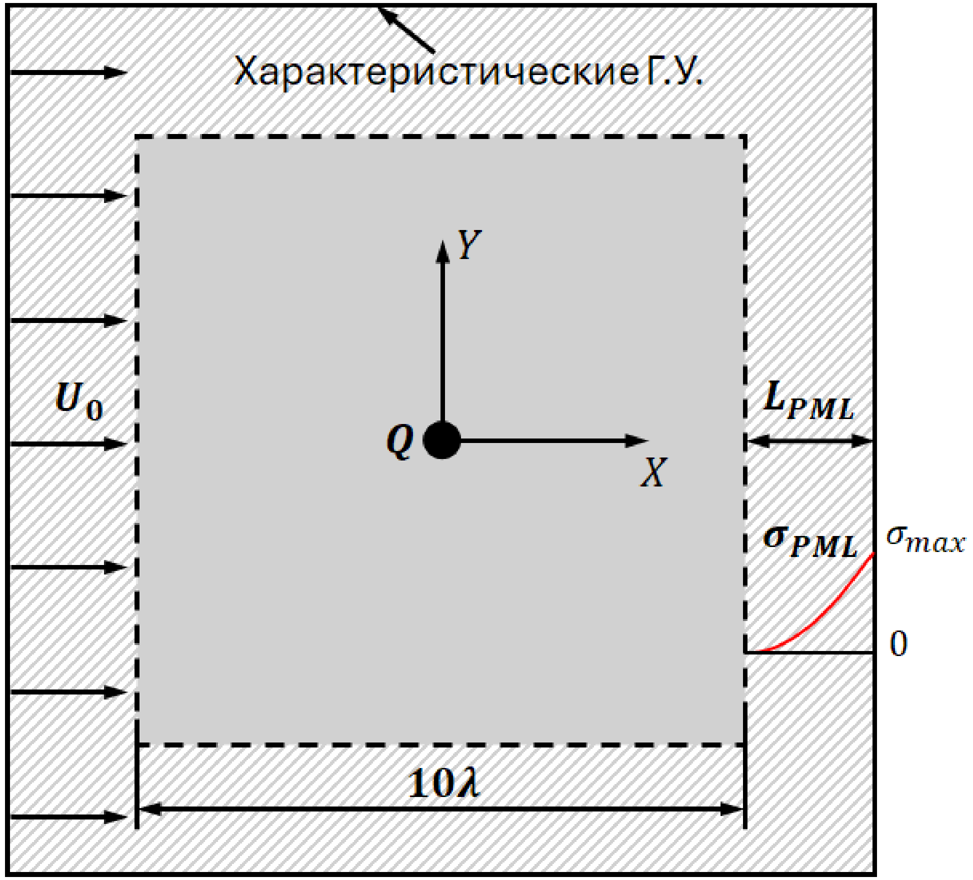
Задача о монополе

- Точечный источник $Q = Q_0 \sin(\omega t)$
- Задача имеет три критерия подобия:
  - $Q'_0 = \frac{Q_0}{\rho_0 \omega} = 0.01, 0.1, 1;$
  - $Re = \frac{c_s^2}{\omega(\nu+\nu_B)} = O(10^8);$
  - $M = \frac{U_0}{c_s} = 0, 0.2$

Условие линейности:
$$\frac{\omega Q_0}{\rho_0 c_s^2} \ll 1$$

- Граничные условия – характеристические + демпфирующий слой (PML);
- Расчетная сетка – однородная декартова с шагом Δx.
- В рамках ур. Навье-Стокса задача описывается системой:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = Q\delta(\vec{r}); \\ \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}\vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) + Q\vec{v}\delta(\vec{r}); \\ p = \rho c_s^2 \end{cases}$$



и имеет аналитическое решение: $p'_a = Re\left[\left(\frac{1}{\beta}\Theta_0^{(2)}\left(\frac{k}{\beta}r_\beta\right) + i\frac{Mx}{r_\beta}\Theta_1^{(2)}\left(\frac{k}{\beta}r_\beta\right)\right)\frac{\omega Q_0}{4i\beta^2}e^{i(\omega t + Mkx/\beta^2)}\right];$

Особенности моделирования источника в рамках LBM

- Вид решаемых решеточных уравнений:

$$f_i(\vec{r}+\vec{c_i}\Delta t, t+\Delta t) - f_i(\vec{r},t) = -\frac{f_i(\vec{r},t) - f_i^{eq}(\vec{r},t)}{\tau}\Delta t + \boxed{\left(1-\frac{\Delta t}{2\tau}\right)S_i\Delta t}$$

Источник

- Источник – схема Gou:

$$S_i = w_i\left(1 + \frac{\vec{c}_i\cdot\vec{v} - \vec{v}^2}{c_s^2} + \frac{\vec{c}_i\vec{c}_i : \vec{v}\vec{v}}{c_s^4}\right)Q\delta(\vec{x})$$

- Данная система восстанавливает систему ур. Навье-Стокса:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\vec{v}) = Q\delta(\vec{r}); \\ \dfrac{D(\rho\vec{v})}{Dt} = \nabla\cdot\underline{\underline{P}} + Q\vec{v}\delta(\vec{r}) - \boxed{\left(\tau-\frac{\Delta t}{2}\right)\nabla\cdot(Q\delta(\vec{r})\vec{v}\vec{v})}; \end{cases}$$

$\rightarrow 0$ при $\boldsymbol{\tau} \rightarrow \boldsymbol{\Delta t/2}$

Граница устойчивости:

$$\mu = \rho c_s^2\left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right)$$

Повышение устойчивости за счет рекурсивной регуляризации [2]

[2] Malaspinas O. Increasing stability and accuracy of the lattice Boltzmann scheme: recursivity and regularization

Результаты расчетов

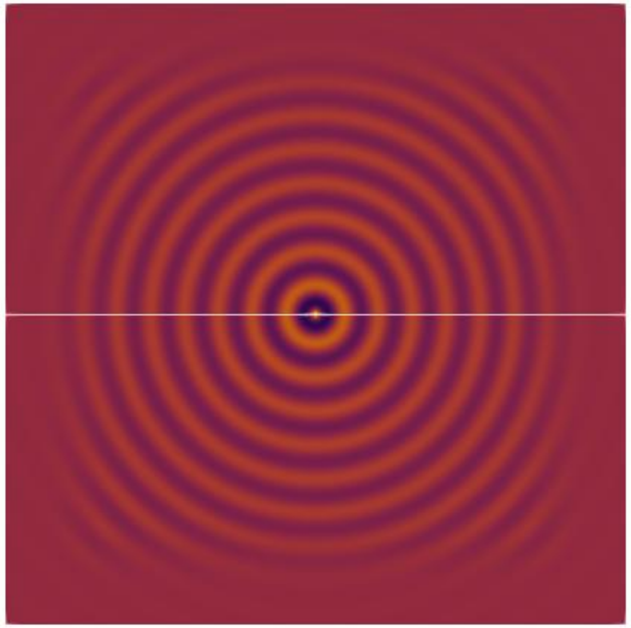
Сравнение численного решения с аналитическим

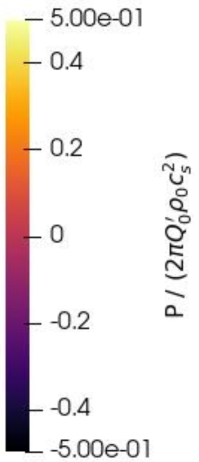
- Волновая картина представлена расходящимися окружностями
- Смещение окружностей в направлении внешнего потока
- Хорошее совпадает с аналитическим решением:

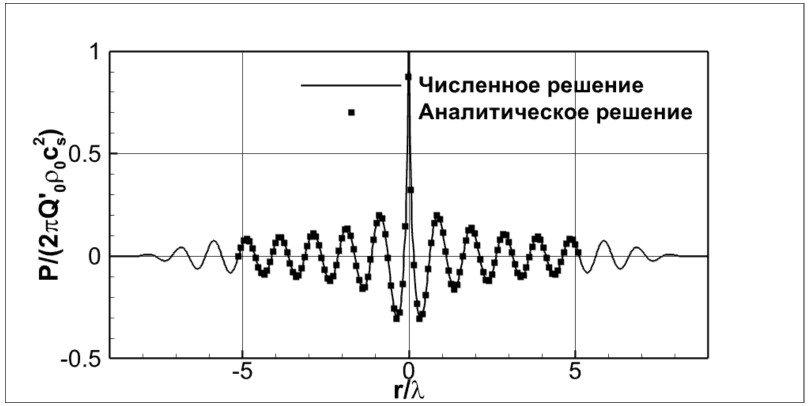
M	Error, %
0	0.47
0.2	0.53

$$Error = \frac{1}{2\lambda}\sum_{x=\lambda}^{3\lambda}\frac{\left||p| - |p_a|\right|}{|p_a|}$$

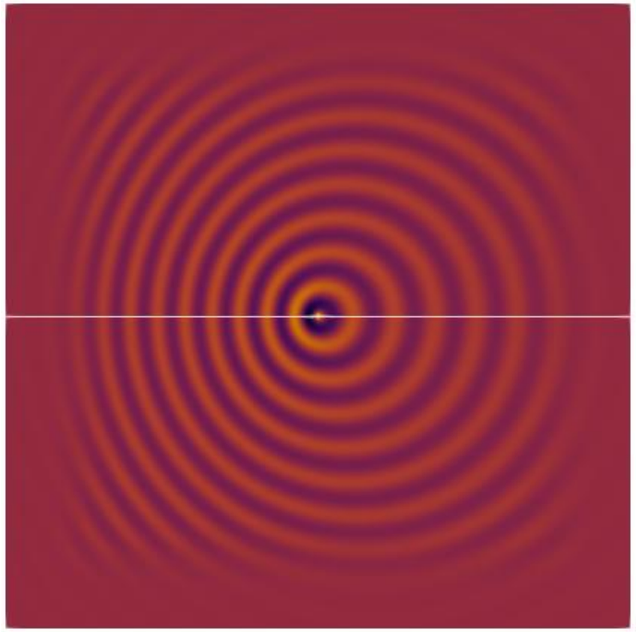
$\boldsymbol{M = 0}$

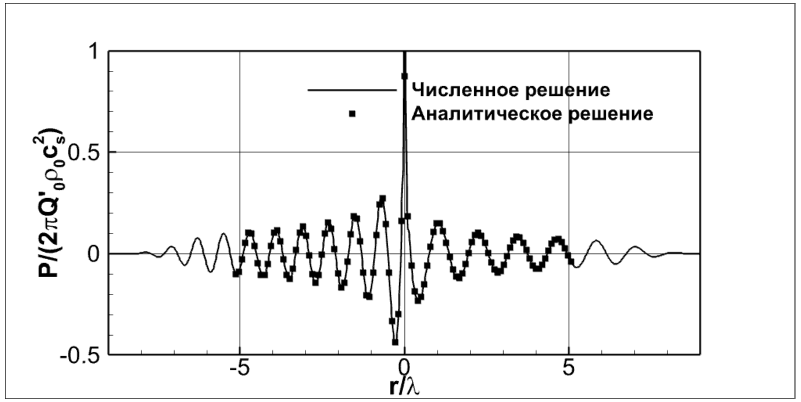




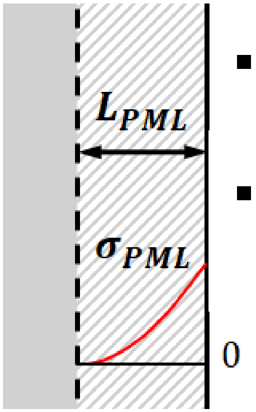


$\boldsymbol{M = 0.2}$

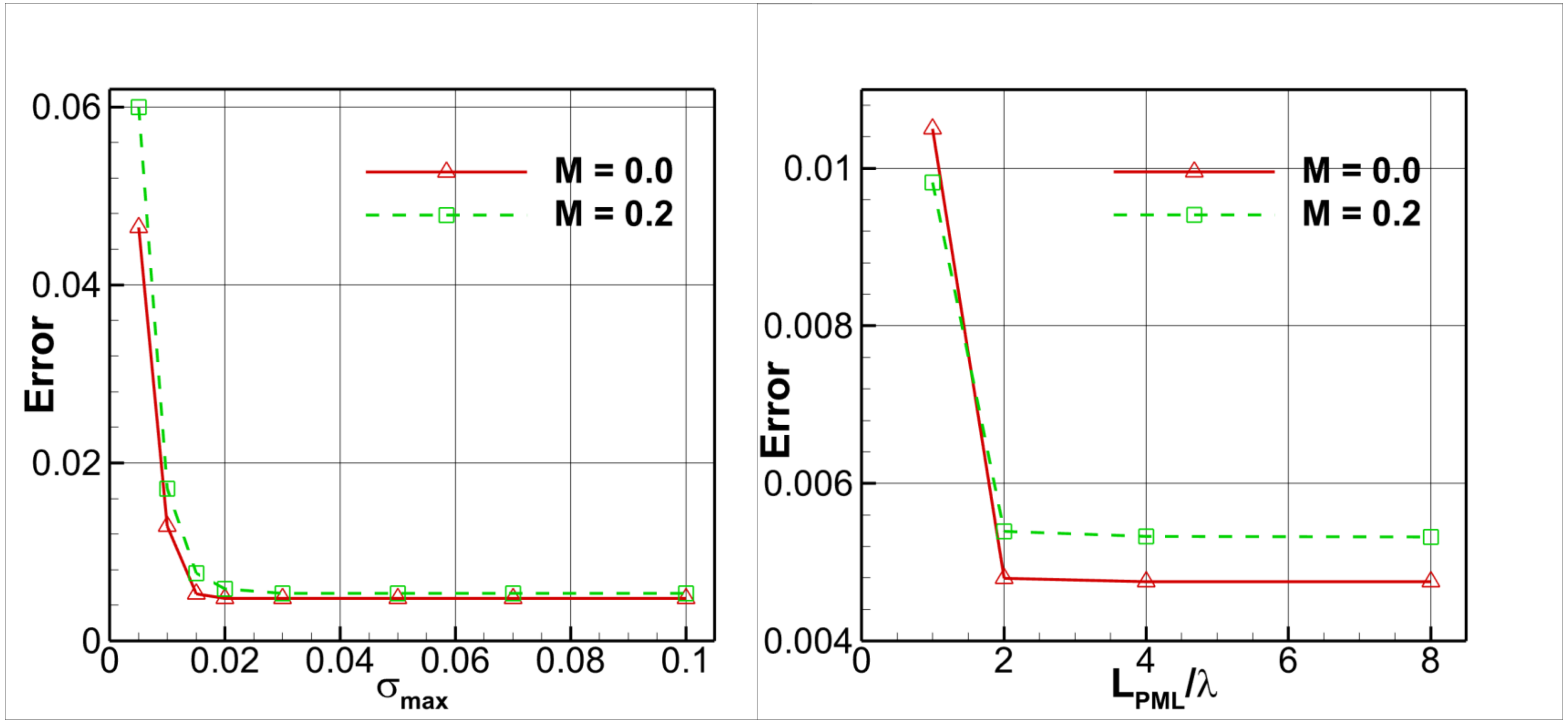




Влияние параметров PML-слоя



- L_{PML} – толщина демпфирующего слоя
- σ_{max} – максимальный коэффициента демпфирования



- При $\sigma_{max} \geq 0.02,\ L_{PML} \geq 2\lambda$ решение можно считать независимым от данных параметров
- Слабое влияние числа Маха

Влияние амплитуды источника

- Резкий рост ошибки при $Q_0' = 1$ связан с нелинейными эффектами:

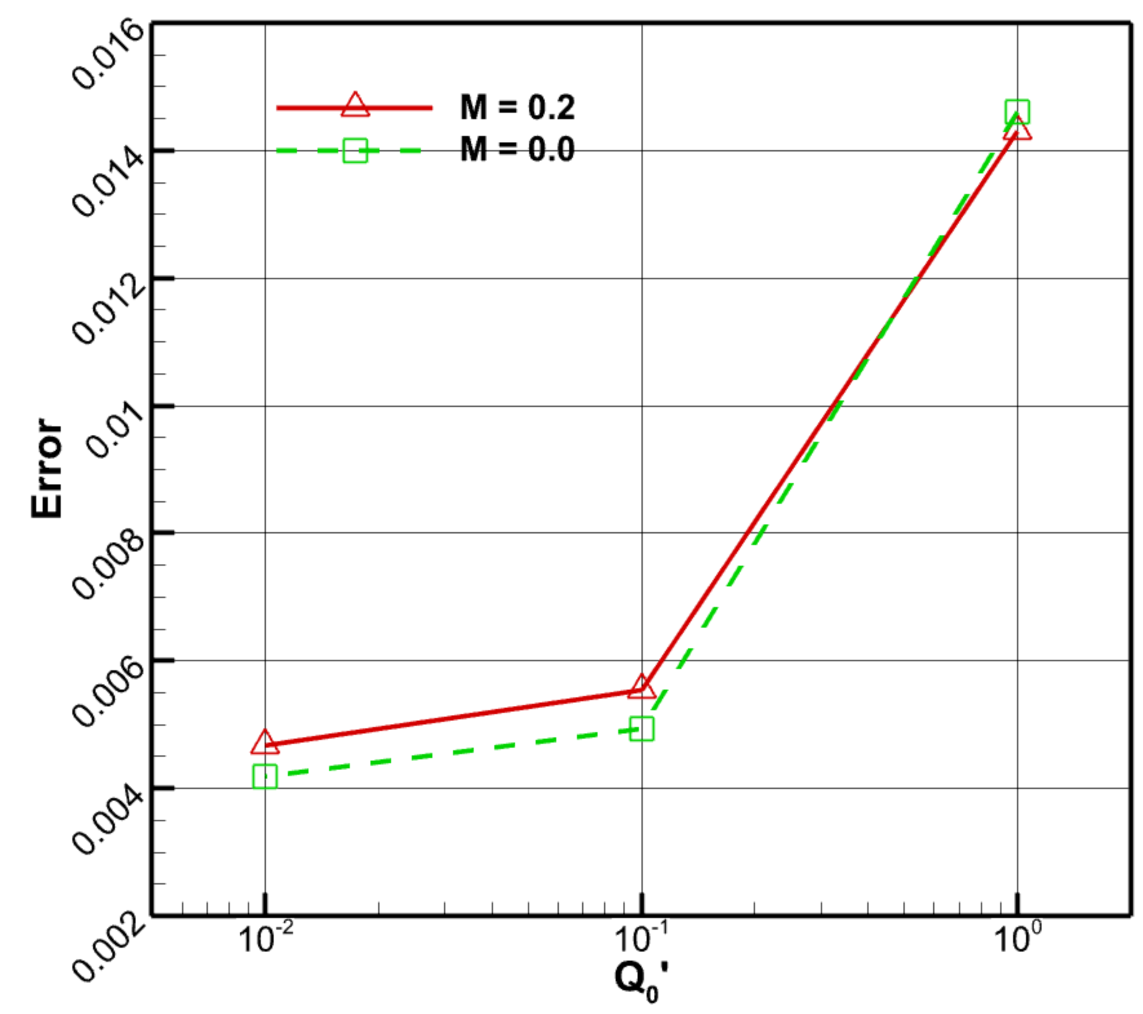
Условие линейности:

$$\frac{\omega Q_0}{\rho_0 c_s^2} \ll 1$$

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

$$\frac{Q_0'}{\frac{1}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{\lambda}{\Delta x}\right)^2} = A \ll 1$$

$\lambda/\Delta x$	Q_0'	A, %
29	1	5
29	0.1	0.5
29	0.01	0.05



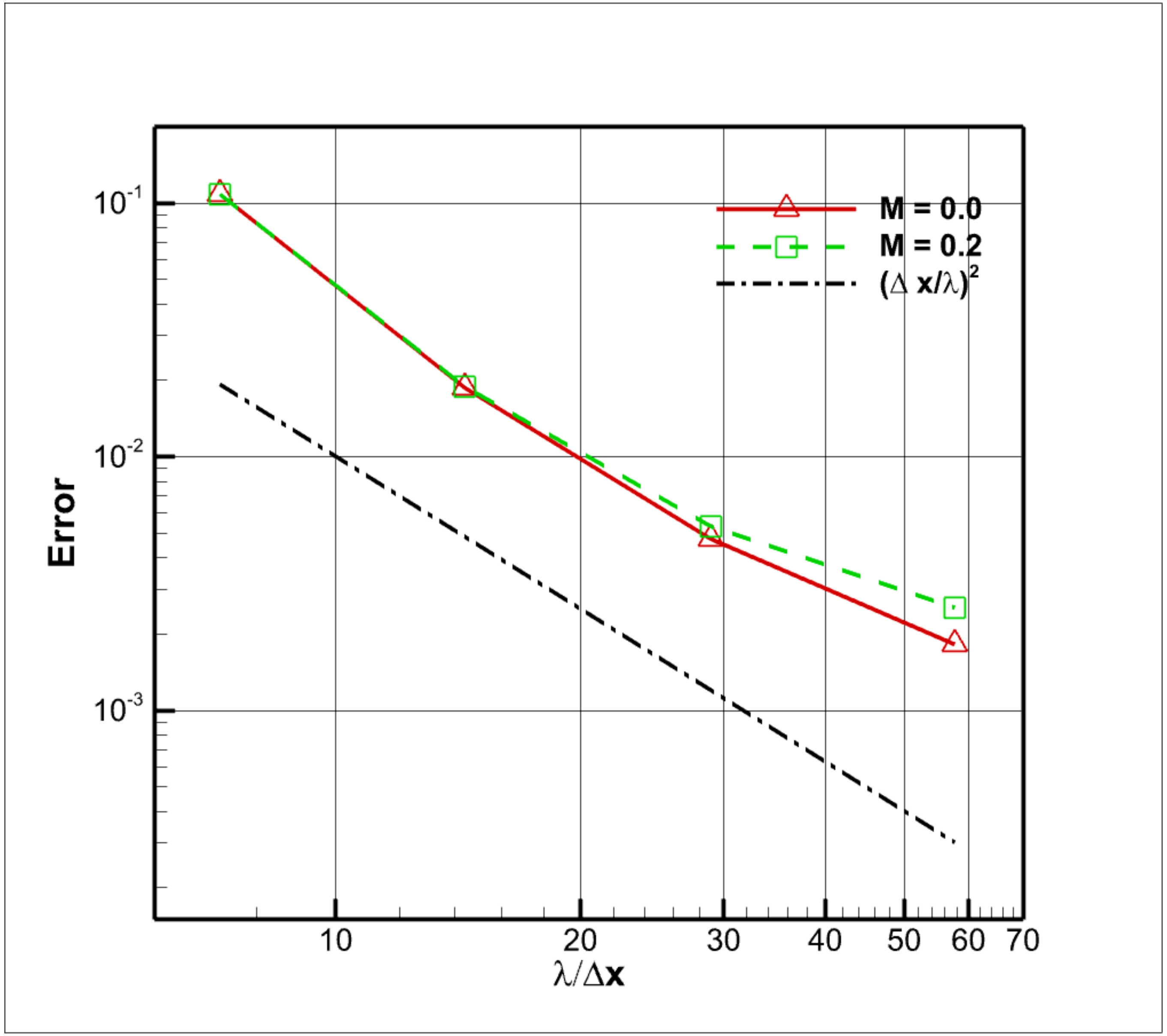
Влияние шага сетки

Параметры моделирования:

- $Q_0' = 0.1;$
- $\sigma_{max} = 0.05, L_{PML} = 4\lambda.$

Результаты:

- Второй порядок точности;
- Погрешность менее 1% при $\frac{\lambda}{\Delta x} = 20.$



Заключение

В результате выполнения работы были получены следующие результаты:

- Проведено систематическое исследование возможностей метода решеточных уравнений Больцмана для описания распространения акустических волн на примере решения задачи о распространении волны от точечного гармонического источника акустических возмущений в неограниченном пространстве.
- Установлено, что параметры PML-слоя оказывают существенное влияние на уровень отраженных волн и определены минимальные допустимые значения коэффициента демпфирования ($\sigma_{max} \geq 0.02$) и толщины слоя ($L_{PML} \geq 2\lambda$).
- Исследование зависимости ошибки от амплитуды источника показало, что при $Q_0' > 0.1$ нелинейные эффекты становятся заметными, что согласуется с аналитической оценкой.
- Показано, что используемый метод имеет второй порядком точности, и при описании волны для обеспечения относительной погрешности менее 1% необходимо использовать не менее 20 точек на длину волны.

Спасибо за внимание!