

УДК 532.7+532.516.5+532.593

ТРЕХМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНЫХ СИСТЕМ ТИПА ЖИДКОСТЬ–ПАР МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА НА GPU

А. Л. Куперштох¹

Сравнительно новый метод решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE) представляет собой дискретную модель сплошной среды. 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. При моделировании фазовых переходов метод LBE представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз. Алгоритм LBE хорошо распараллеливается на большое количество потоковых процессоров в современных графических картах (Graphics Processing Unit, GPU). Приведены примеры трехмерного моделирования спинодальной декомпозиции, разрыва тонких пленок жидкости за счет термокапиллярного эффекта и процесса разрушения тонкостенного жидкого пузыря. Ускорение расчетов достигает 70–90 раз. Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 годы” (проект № 07.514.11.4106).

Ключевые слова: метод решеточных уравнений Больцмана, фазовые переходы, динамика многофазных сред, компьютерное моделирование, параллельные вычисления, графические процессоры.

Введение. В настоящее время широко применяется компьютерное моделирование течений среды методом решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE). Метод LBE широко используется для компьютерного моделирования течений жидкости, включая многофазные и многокомпонентные [1–4].

Решеточные методы являются сравнительно новым классом методов, в которых используется мезоскопический подход к описанию вещества. Метод LBE 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. До настоящего времени параллельные вычисления на одной или нескольких видеокартах (Graphics Processing Unit, GPU) применялись только для простых вариантов метода LBE без фазовых переходов [5–9].

1. Метод 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 гидрогазодинамики достаточно использовать дискретный конечный набор скоростей частиц c_k . Это фактически означает, что непрерывная функция распределения $\varphi(\xi)$ по микроскопическим скоростям ξ заменяется на систему δ -функций вида $\sum_k N_k \delta(\xi - c_k)$. Кроме того, в методе LBE скорости c_k выбираются таким образом, чтобы за шаг по времени Δt частицы перелетали в соседние узлы регулярной пространственной решетки, векторы которой удовлетворяют условию $e_k = c_k \Delta t$ [1, 2]. Для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19 [11] возможный набор векторов скорости ($k = 0, 1, \dots, b; b = 18$) показан на рис. 1.

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

¹ ФГБУН Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН (ИГиЛ СО РАН), просп. Лаврентьева, 15, 630090, Новосибирск; вед. науч. сотр., e-mail: skn@hydro.nsc.ru

Уравнение эволюции для функций распределения N_k имеют вид

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

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

$$\Omega_k = \frac{1}{\tau} (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) - \tilde{N}_k(\mathbf{x}, t)), \tag{1}$$

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 имеем $\theta = \frac{1}{3}(h/\Delta t)^2$ [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

$$\tilde{N}_k(\mathbf{x}, t) = N_k(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k \Delta t, t - \Delta t). \tag{2}$$

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

$$\rho = \sum_{k=0}^b \tilde{N}_k, \tag{3}$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^b \mathbf{c}_k \tilde{N}_k. \tag{4}$$

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

$$N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \rho w_k \left(1 + \frac{\mathbf{c}_k \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2\theta} \right). \tag{5}$$

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:

$$N_k(\mathbf{x}, t) = \tilde{N}_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(\tilde{N}(\mathbf{x}, t)) + \Delta \tilde{N}_k. \tag{6}$$

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

$$\Delta \tilde{N}_k(\mathbf{x}, t) = N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}). \tag{7}$$

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

$$\mathbf{u} + \Delta \mathbf{u} = \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \mathbf{F} \Delta t. \tag{8}$$

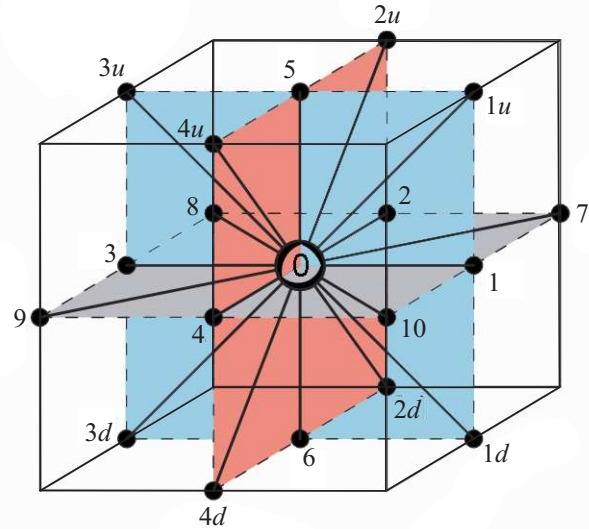


Рис. 1. Возможные векторы скорости частиц в методе решеточных уравнений Больцмана для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19.

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

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

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

2. Моделирование фазовых переходов. Компьютерное моделирование фазовых переходов методом LBE представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз, в том числе и вновь возникающих в объеме вещества [19–21]. 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 [20] было предложено вместо сил притяжения между узлами использовать значение полной силы \mathbf{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

$$\mathbf{F} = -\nabla U. \quad (9)$$

В [21] для описания уравнения состояния произвольного вида $P(\rho, T)$ псевдопотенциал был записан в форме

$$U = P(\rho, T) - \rho\theta. \quad (10)$$

В [22–24] нами предложено для модели [21] ввести новую функцию

$$\Phi = \sqrt{-U}. \quad (11)$$

Тогда выражение для силы (9) можно переписать в эквивалентном виде

$$\mathbf{F} = A \nabla(\Phi^2) + 2(1 - A)\Phi \nabla \Phi, \quad (12)$$

где A — свободный параметр.

Конечно-разностная формула для уравнения (12), обеспечивающая достаточную изотропность для трехмерной модели D3Q19 [22–24] и записанная в векторной форме, имеет вид

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\alpha h} \left[(1 - 2A)\Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k + A \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k \right]. \quad (13)$$

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 $\alpha = 3$.

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

$$\tilde{P} = \frac{8\tilde{\rho}\tilde{T}}{3 - \tilde{\rho}} - 3\tilde{\rho}^2. \quad (14)$$

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

Аппроксимация (13) 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 $\tilde{T} = 0.4$ [22].

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

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

где R_1 и R_2 — главные радиусы кривизны поверхности. Величина поверхностного натяжения σ зависит от уравнения состояния флюида [25], при этом σ уменьшается с увеличением температуры и обращается в нуль в критической точке.

В [15, 22, 24] было показано, что при моделировании фазовых переходов в методе LBE для учета действия сил следует использовать метод точной разности (7). Результаты, полученные другими известными методами учета действия сил [19, 26] (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 [27] результаты не зависят от времени релаксации τ , но приводят к сильно сдвинутым значениям плотности пара на кривой сосуществования [15, 22, 24].

3. 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 $c_s = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T}$ — скорость звука для изотермических вариантов метода LBE, 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 $\tilde{c} = \sqrt{k \left(\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{\rho}}\right)_T}$, где

безразмерный параметр $k = P_{кр} \left(\frac{\Delta t}{h}\right)^2 \frac{1}{\rho_{кр}}$ определяется характеристиками вещества и величиной шагов по времени и координате. Как обычно, для устойчивости численных расчетов необходимо относительно малое отношение $\Delta t / h$ [17].

4. Метод расщепления алгоритма LBE. Ниже представлен алгоритм метода LBE с фазовыми переходами, который состоит из нескольких шагов, выполняемых последовательно (метод Яненко — расщепление по физическим процессам).

1. Перенос значений функций распределения вдоль характеристик (2).
2. Вычисление новых значений плотности ρ по (3) и значений функции Φ с использованием (10), (11) и уравнения состояния, например (14).
3. Вычисление полной силы взаимодействия (13), действующей на узел (т.е. значения градиента псевдопотенциала).
4. Вычисление значений скорости в узле до и после действия сил (4) и (8) соответственно. Вычисление соответствующих равновесных функций распределения (5).
5. Изменение функций распределения в узлах (6) за счет действия оператора столкновений (1) и за счет действия сил с использованием метода точной разности (7).

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 эффективно его распараллеливать на большое количество ядер GPU.

5. Параллельные вычисления на графических ускорителях. Графические процессоры на видеокартах (Graphics Processing Unit, GPU) 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].

В настоящей работе параллельные расчеты выполнялись на графическом ускорителе GTX-580, имеющем 512 потоковых процессоров (ядер). Все ядра имеют доступ к относительно быстрой общей внутренней памяти объемом 3 Гб. 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 (1)–(8), (10), (11), (13), (14).

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 примерно 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 (32 768 на один 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 (Compute Unified Device Architecture) [28].

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.

Для варианта метода LBE с фазовыми переходами ускорение нашего алгоритма для 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. Для трехмерных расчетов использовались расчетные сетки размерами до $256 \times 256 \times 224$ для GTX-580 при 3 Гб общей внутренней памяти.

Архитектура GPU задает организацию вычислений по блокам, в каждом из которых может запускаться до 1024 потоков. 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. 2 показан пример разбиения трехмерной расчетной области размером $nx \times ny \times nz$ на блоки, а каждого блока — на потоки.

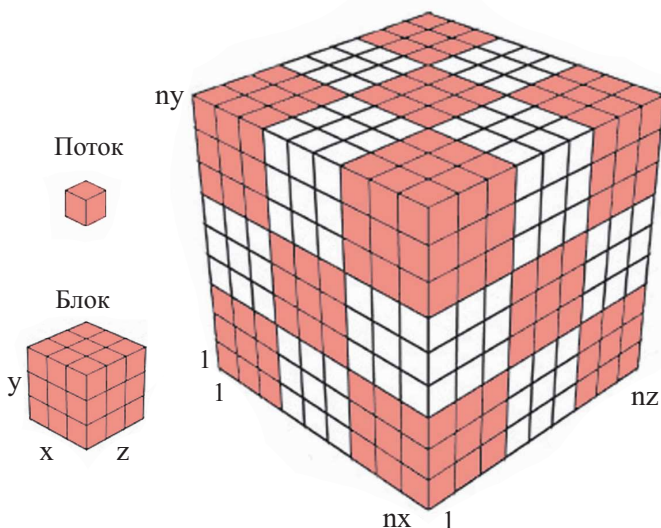


Рис. 2. Пример разбиения расчетной области на блоки и потоки

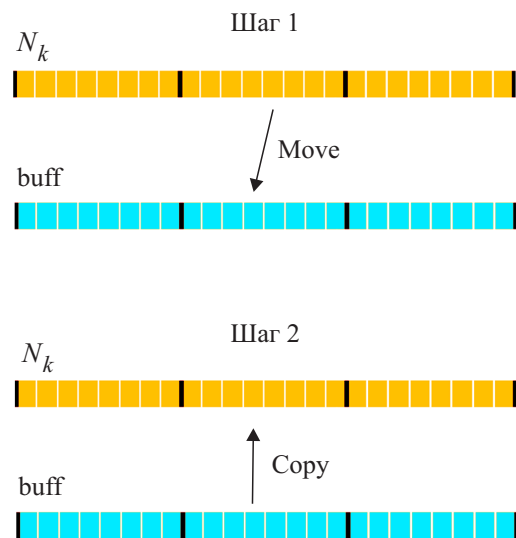


Рис. 3. Схема переноса значений функций распределения N_k в соседние узлы через буферный массив

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:

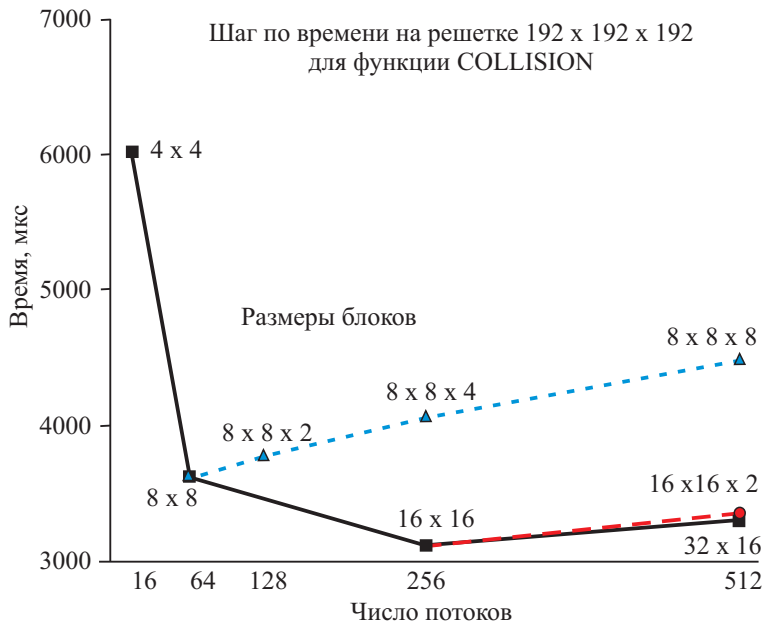
```
i=(blockIdx.z*blockDim.z + threadIdx.z+1)*ny*nx
+ (blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y+1)*nx
+ blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x+1.
```

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).

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. 4. Оптимальными для этой ядерной функции оказались двумерные блоки размером $16 \times 16 \times 1$.

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 для случая оптимизации объема памяти. Для первых четырех функций использовались двумерные блоки $16 \times 16 \times 1$.

Чистые затраты времени на выполнение всех ядерных функций за один шаг LBE-метода составляют примерно 10 нс на один узел, при этом производительность GTX-580 составляет ~ 100 MNUPS (Million Node Updates Per Second), т.е. до 100 миллионов узлов сетки в секунду.



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

| Функция | мкс/шаг | % |
|------------|---------|------|
| Collision | 66 577 | 42.5 |
| Density | 21 299 | 13.6 |
| Force | 13 934 | 8.9 |
| Move+Copy | 49 944 | 31.9 |
| Boundaries | 1392 | 0.9 |
| Всего: | 153 146 | 100 |

Рис. 4. Время, затрачиваемое на один шаг вычисления ядерной функции COLLISION, при разных размерах блоков

6. Примеры моделирования двухфазных систем. Ниже приведены результаты моделирования ряда двухфазных систем жидкость-пар.

На рис. 5 показаны результаты трехмерного моделирования спиноподальной декомпозиции первоначально однородного состояния вещества, находящегося под спиноподалью, на двухфазную систему жидкость-пар. Со временем мелкомасштабные структуры укрупняются.

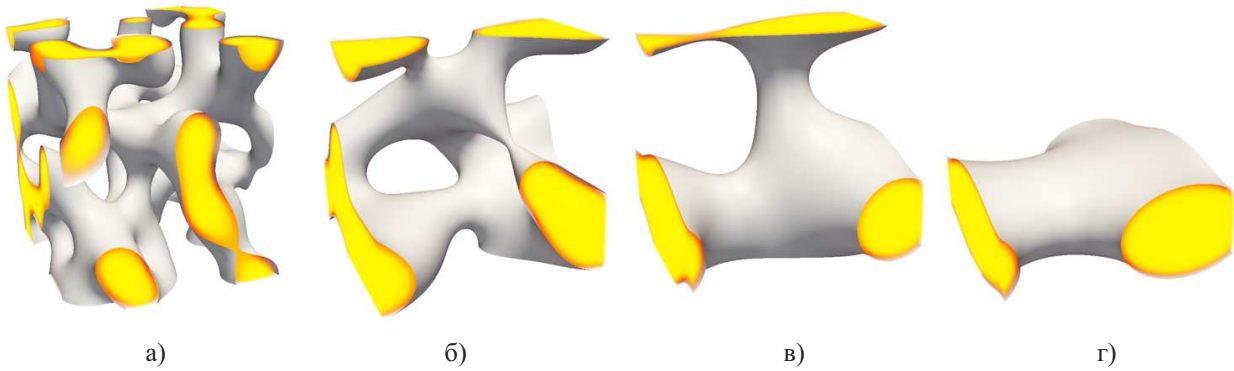


Рис. 5. Спинодальная декомпозиция. Паровая фаза показана прозрачной. Расчетная сетка $96 \times 96 \times 96$, $t = 2000$ (а), 3000 (б), 4000 (в), 7600 (г)

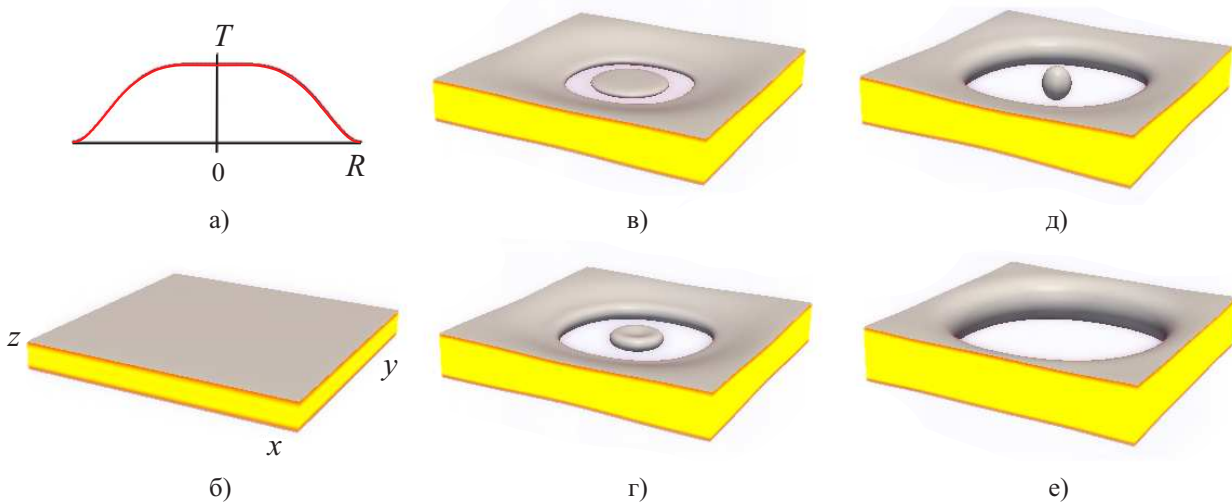


Рис. 6. Трехмерное моделирование термокапиллярного эффекта (эффект Марангони) для свободно висящей пленки жидкости. Толщина пленки $d = 24$. Расчетная сетка $256 \times 256 \times 224$, $t = 0$ (б), 3100 (в), 3400 (г), 3700 (д), 4200 (е)

На рис. 6 показаны результаты моделирования термокапиллярного эффекта для свободно висящей пленки, вдоль которой имеется неравномерное распределение температуры

$$T = \begin{cases} T_0 + \Delta T \left(1 + \cos\left(\pi(r/R)^2\right)\right) & \text{при } r < R, \\ T_0 & \text{при } r \geq R, \end{cases}$$

показанное на рис. 6а, где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Граничные условия по x и по y периодические.

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.

На рис. 7 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.

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

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

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

Здесь ΔN_k^s и ΔN_k^σ — 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 $\mathbf{F}_d^s = -\mathbf{F}_d^\sigma = -\beta \rho^s \rho^\sigma (\mathbf{u}^s - \mathbf{u}^\sigma)$, где $\rho^s = \sum_k N_k^s$ и $\rho^\sigma = \sum_k N_k^\sigma$ — плотности вещества компонентов смеси, а $\mathbf{u}^s = \sum_k \frac{N_k^s \mathbf{c}_k}{\rho^s}$ и $\mathbf{u}^\sigma = \sum_k \frac{N_k^\sigma \mathbf{c}_k}{\rho^\sigma}$ — скорости компонентов в данном узле.

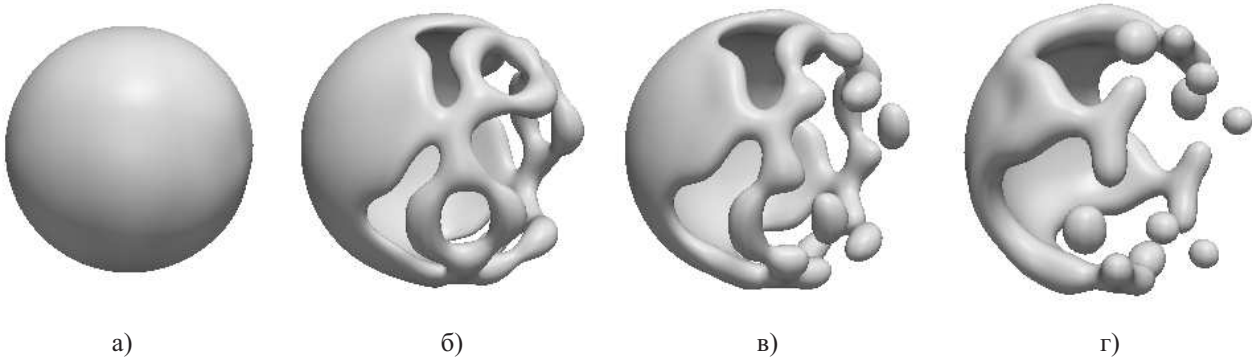


Рис. 7. Моделирование разрушения трехмерного тонкостенного жидкого пузыря. Расчетная сетка $192 \times 192 \times 192$, $t = 0$ (а), 1000 (б), 1100 (в), 1350 (г)

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

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

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

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

В некоторый момент времени в стенке пузыря возникают отверстия, которые быстро расширяются (рис. 7а и 7б). Затем происходит образование брызг в виде капель жидкости (рис. 7в и 7г), которые позже испаряются.

7. Заключение. Метод LBE достаточно прост и эффективен для моделирования широкого круга течений жидкости с возможными фазовыми переходами жидкость–пар.

Рассмотренный LBE-алгоритм весьма успешно реализован для параллельных вычислений на многопроцессорных графических ускорителях NVIDIA с использованием технологии программирования CUDA, что дает новые возможности для численного моделирования двухфазных многокомпонентных систем.

Для варианта метода LBE с фазовыми переходами жидкость–пар параллельная реализация нашего алгоритма на GTX-580 при вычислениях с двойной точностью в 70–90 раз быстрее, чем при вычислениях на одном ядре процессора Intel Core 2 Duo с частотой 3.3 ГГц.

Производительность графического ускорителя GTX-580 для метода LBE с одним компонентом и фазовыми переходами жидкость–пар составляет примерно 100 миллионов узлов сетки в секунду (100 MNUPS, Million Node Updates Per Second).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *McNamara G.R., Zanetti G.* Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // Physical Review Letters. 1988. **61**, N 20. 2332–2335.

2. *Higuera F.J., Jiménez J.* Boltzmann approach to lattice gas simulations // *Europhys. Lett.* 1989. **9**, N 7. 663–668.
3. *Chen S., Doolen G.D.* Lattice Boltzmann method for fluid flow // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998. **30**. 329–364.
4. *Aidun C.K., Clausen J.R.* Lattice-Boltzmann method for complex flows // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2010. **42**. 439–472.
5. *Li W., Wei X., Kaufman A.* Implementing lattice Boltzmann computation on graphics hardware // *Visual Computer.* 2003. **19**. 444–456.
6. *Tölke J., Krafczyk M.* TeraFLOP computing on a desktop PC with GPU for 3D CFD // *Int. J. of Computational Fluid Dynamics.* 2008. **22**, N 7. 443–456.
7. *Janßen C., Krafczyk M.* Free surface flow simulations on GPGPU using the LBM // *Computers and Mathematics with Applications.* 2011. **61**, N 12. 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., Семин Д.С.* Моделирование динамики газа при помощи решеточного метода Больцмана // *Вычислительные методы и программирование.* 2011. **12**. 227–231.
10. *Broadwell J.E.* Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method // *J. Fluid Mech.* 1964. **19**. 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. **21**. 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. **94**, N 3. 511–525.
13. *Koelman J.M.V.A.* A simple lattice Boltzmann scheme for Navier–Stokes fluid flow // *Europhys. Lett.* 1991. **15**, N 6. 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 // Докл. VII Межд. научн. конф. “Современные проблемы электрофизики и электрогидродинамики жидкостей”. Санкт-Петербург, 2003. 152–155.
15. *Kupershtokh A.L.* New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation // Proc. of the 5th Int. EHD Workshop. Poitiers (France), 2004. 241–246.
16. *Куперштох А.Л.* Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // Вестн. НГУ. Серия “Математика, механика и информатика”. 2004. **4**, № 2. 75–96.
17. *Kupershtokh A.L.* Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // *Computers and Mathematics with Applications.* 2010. **59**, N 7. 2236–2245.
18. *Ginzburg I., Adler P.M.* Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model // *J. Phys. II France.* 1994. **4**, N 2. 191–214.
19. *Shan X., Chen H.* Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components // *Physical Review E.* 1993. **47**, N 3. 1815–1819.
20. *Qian Y.H., Chen S.* Finite size effect in lattice-BGK models // *Int. J. of Modern Physics C.* 1997. **8**, N 4. 763–771.
21. *Zhang R., Chen H.* Lattice Boltzmann method for simulations of liquid–vapor thermal flows // *Phys. Rev. E.* 2003. **67**, N 6. 066711.
22. *Куперштох А.Л.* Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана // Вестн. НГУ. Серия “Математика, механика и информатика”. 2005. **5**, № 3. 29–42.
23. *Kupershtokh A.L., Karpov D.I., Medvedev D.A., Stamatelatos C.P., Charalambakos V.P., Pyrgiotti E.C., Agoris D.P.* Stochastic models of partial discharge activity in solid and liquid dielectrics // *IET Science, Measurement and Technology.* 2007. **1**, N 6. 303–311.
24. *Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., Karpov D.I.* On equations of state in a lattice Boltzmann method // *Computers and Mathematics with Applications.* 2009. **58**, N 5. 965–974.
25. *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. **61**, N 12. 3537–3548.
26. *He X., Shan X., Doolen G.D.* Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases // *Phys. Rev. E.* 1998. **57**, N 1. R13–R16.
27. *Guo Z., Zheng C., Shi B.* Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method // *Phys. Rev. E.* 2002. **65**, N 4. 046308(6).
28. NVIDIA CUDA C. Programming Guide. Version 4.0. 2011.

Поступила в редакцию
08.01.2012