


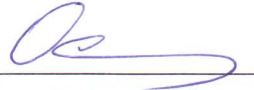


## СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

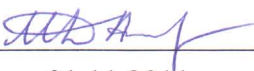
Руководитель темы,  
вед. науч. сотр.  А.Л. Куперштох (введение, разделы 1-3, заключ.)  
д-р физ.-мат. наук 01.11.2011


Ответственные исполнители:

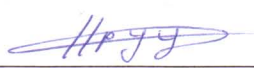
Зав. лабораторией  А.П. Ершов (раздел 1)  
д-р физ.-мат. наук 01.11.2011

Глав. науч. сотр.  В.В. Остапенко (раздел 1)  
д-р физ.-мат. наук 01.11.2011


Глав. науч. сотр.  А.Л. Лукьянчиков (раздел 1)  
д-р физ.-мат. наук 01.11.2011

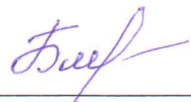
Ст. науч. сотр.  Д.А. Медведев (раздел 1)  
канд. физ.-мат. наук 01.11.2011

Ст. науч. сотр.  Д.И. Карпов (раздел 1)  
канд. физ.-мат. наук 01.11.2011

Ст. науч. сотр.  Э.Р. Прууэл (раздел 1)  
канд. физ.-мат. наук 01.11.2011

Науч. сотр.  Н.П. Сатонкина (раздел 1, нормоконтроль)  
канд. физ.-мат. наук 01.11.2011

Науч. сотр.  А.О. Кашкаров (раздел 1)  
01.11.2011

Студент  Т.А. Бондаренко (раздел 1)  
01.11.2011

## РЕФЕРАТ

Часть № 1 отчета о научно-исследовательской работе «Выбор направления исследований» по контракту № 07.514.11.4106 от 26 октября 2011 г. содержит: 86 страниц, 3 рисунка, 3 таблицы, 127 использованных источника.

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 первом 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 первого этапа работы получены следующие результаты:

- 1) Проведен аналитический обзор информационных источников.
- 2) Проведены патентные исследования объекта НИР.
- 3) Выполнены исследования объекта НИР, на основании которых выбраны направления дальнейших исследований, то есть, выбрана конфигурация оборудования, необходимого для выполнения исследований объекта НИР и состав программного обеспечения.

4) За счет внебюджетных средств проведена сборка станции с двумя графическими картами GTX-580 фирмы NVIDIA для проведения параллельных вычислений на графических процессорах. На собранной станции установлено необходимое программное обеспечение. Выполнено тестирование оборудования вычислительной станции.

5) 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, полученные на данном этапе НИР, будут внедрены (использованы) на последующих этапах НИР. Внедрение результатов (разрабатываемых алгоритмов и методов моделирования) в инженерную практику возможно только после окончания НИР.

Областью применения результатов, полученных на данном этапе НИР, может являться Экспериментальный образец программных реализаций алгоритмов и методов, планируемы к разработке на втором этапе работ по Контракту.

Экономической эффективности результаты НИР на данном этапе исследований иметь не могут. Вместе с тем, Ученый совет ИГиЛ СО РАН, на котором принимался отчет по данному этапу работы, отметил важность результатов работы и перспективность ее продолжения.

Дальнейшее развитие объекта исследований заключается:

1) В создании Экспериментального образца программных реализаций алгоритмов и методов, разработанных в рамках выполнения НИР первого этапа.

2) В использовании следующих версий графических процессоров “Kepler” и “Maxwell” вместо графических процессоров “Fermi”, существующих в настоящее время. Графические процессоры “Kepler” планируются к выпуску в первом квартале 2012 г. (согласно информации, полученной нами непосредственно из фирмы NVIDIA) и будут иметь производительность в 3 раза выше.

## СОДЕРЖАНИЕ

РЕФЕРАТ .....	3
ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ .....	5
ВВЕДЕНИЕ .....	7
1 Аналитический обзор информационных источников .....	12
1.1 Метод решеточного уравнения Больцмана для расчета многокомпонентных и многофазных течений .....	12
1.2 Метод подвижных клеточных автоматов .....	21
1.3 Расчет теплопереноса в подвижной среде конечно-разностным методом	29
1.4 Применение графических процессоров для параллельных вычислений ...	33
2 Исследование объекта НИР .....	36
3 Выбор направления исследований .....	37
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	39
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	40
ОТЧЕТ О ПАТЕНТНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ	53

## ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

Аббревиатура	Расшифровка
LBE	Решеточное уравнение Больцмана (Lattice Boltzmann Equation)
LBM	Метод решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Method)
MCA	Подвижные клеточные автоматы (Movable Cellular Automata)
GPU	Графический процессор (Graphics Processing Unit)
CPU	Центральный процессор (Central Processing Unit)
TVD	Минимизация полной вариации (Total Variation Diminishing)

## ВВЕДЕНИЕ

Часть 1 настоящего отчета содержит результаты работ, связанных с разработкой теории и основ решеточных методов и методов клеточных автоматов. 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 одновременное моделирование многокомпонентной и многофазной гидродинамики с учетом теплообмена, а также процессов деформации и разрушения. Эти алгоритмы и методы будут реализованы на новейших высокопроизводительных графических процессорах, что позволит значительно увеличить скорость и точность моделирования, а также в несколько раз сократить электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности.

2 Краткий анализ состояния исследований (в РФ и за рубежом).

2.1 Метод решеточных уравнений Больцмана

Решеточные методы представляют собой новый класс методов, использующих мезоскопический подход к описанию вещества. Метод LBE представляет собой дискретную модель сплошной среды [1, 2]. 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) [3-5]. 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, который приведен в работах [6-8]. На основании этого предложена модель LBE с учетом фазовых переходов жидкость-пар согласно используемому уравнению состояния [9-12]. Предлагаемые в этих работах алгоритмы обеспечивают описание кривой сосуществования жидкость-пар с высокой точностью.

Авторы проекта уже имеют большой опыт моделирования мультифизических задач, в том числе и многокомпонентных [10,13-19].

Таким образом, судя по участию в Международных конференциях, посвященных методу LBE, и по известным публикациям в рейтинговых журналах, серьезные исследования по методу LBE в Российской Федерации проводятся в течение ряда лет только в Институте гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН (Новосибирск) коллективом исполнителей данного проекта.

Предложенные нами алгоритм учета действия объемных сил и реализация метода LBE с фазовыми переходами [6-12] опережают мировой уровень, что признано зарубежными исследователями [20-22].

## 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 [23]. 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 [24].

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 ГЦК 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 [25].

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 Параллельные вычисления на графических ускорителях.

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. Впервые графические процессоры (GPU) были использованы для моделирования методом LBE в работе [27].

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 вычислительная часть – всего ~20%.
- Внутренняя память GPU (3 Гб для 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 АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОБЗОР ИНФОРМАЦИОННЫХ ИСТОЧНИКОВ

## 1.1 Метод решеточного уравнения Больцмана для расчета многокомпонентных и многофазных течений

Основная идея, предложенная в [28], 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  $\xi$  заменяется на систему  $\delta$ -функций вида  $\sum_k N_k \delta(\xi - \mathbf{c}_k)$  (рис. 1).

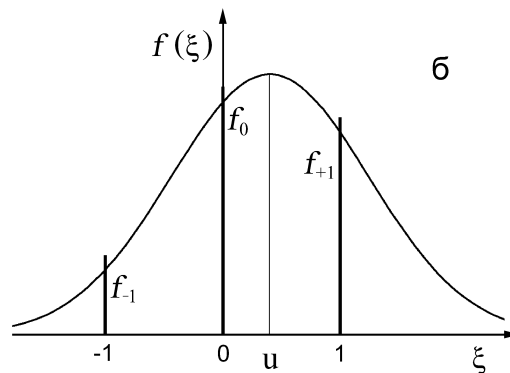


Рисунок 1 Функции распределения по скоростям для одномерного случая.

Кроме того, в методе LBE скорости  $\mathbf{c}_k$  выбираются таким образом, чтобы за шаг по времени  $\Delta t$  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 [29] возможный набор векторов скорости ( $k = 0, 1, \dots, b$ ,  $b = 18$ ) показан на рис. 2.

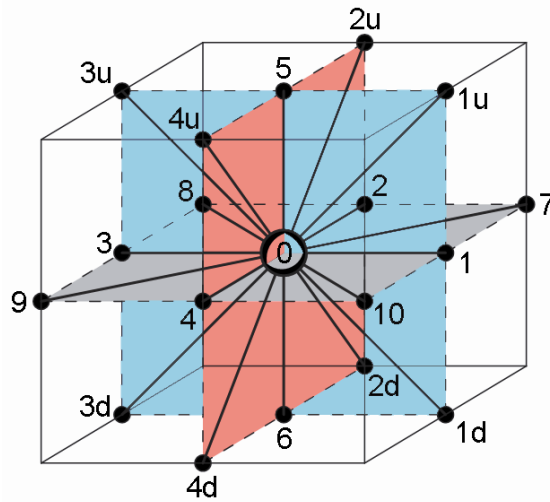


Рисунок 2 Возможные вектора скорости частиц в методе решеточных уравнений Больцмана для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19.

В методе LBE в качестве переменных используются коэффициенты перед  $\delta$ -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  $N_k$  имеют вид

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

где  $\Omega_k$  – оператор столкновений, а  $\Delta N_k$  – изменение функций распределения за счет действия объемных сил (внутренних и внешних). Обычно используется оператор столкновений в виде BGK (Bhatnagar – Gross – Krook [30]) приближения:

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

которое представляет собой просто релаксацию к локальному равновесию. Безразмерное время релаксации  $\tau$  определяет кинематическую вязкость  $\nu = \theta(\tau - 1/2)\Delta t$ . Изменяя в определенных пределах параметр  $\tau > 1/2$  можно изменять вязкость жидкости. Здесь  $\theta$  – нормированная кинетическая температура псевдо-частиц. Для трехмерной изотермической модели LBE D3Q19 она равна  $\theta = (h/\Delta t)^2 / 3$  [29], где  $h$  – шаг решетки.

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

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

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

Для изотермических вариантов LBE-моделей используется разложение равновесных функций распределения Максвелла – Больцмана в ряд по скорости  $\mathbf{u}$  до второго порядка [31]

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

Вектора  $\mathbf{c}_k$  и коэффициенты  $w_k$  зависят от конкретной решетки. Для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19 допустимы 3 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  $w_{7-18} = 1/36$  [29].

Для учета действия объемных сил в методе LBE нами предложен метод точной разности [6-8, 32]

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

где изменение скорости за шаг по времени определяется полной силой  $\mathbf{F}$ , действующей на вещество в узле,

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

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 [7, 33].

Компьютерное моделирование фазовых переходов методом LBE представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз, в том числе и вновь возникающих в объеме вещества [3-5]. 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 [3] 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 [4] 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  $U(\rho) = P(\rho) - \rho\theta$ .

В [5] для описания уравнения состояния произвольного вида  $P(\rho, T)$  сила, действующая на вещество в узле, и псевдопотенциал были записаны в форме

$$\mathbf{F} = -\nabla U, \quad (11)$$

где

$$U = P(\rho, T) - \rho\theta. \quad (12)$$

В [9-11] нами предложено для модели [5] ввести новую функцию

$$\Phi = \sqrt{-U}. \quad (13)$$

Тогда выражение для силы (11) можно переписать в эквивалентном виде

$$\mathbf{F} = A\nabla(\Phi^2) + (1-A)2\Phi\nabla\Phi, \quad (14)$$

где  $A$  – свободный параметр.

Конечно-разностная формула для уравнения (14), обеспечивающая достаточную изотропность для трехмерной модели D3Q19 [9-11], записанная в векторной форме, имеет вид

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{ah} \left[ (1-2A)\Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k + A \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k \right]. \quad (15)$$

Здесь  $G_k > 0$  – коэффициенты, которые различны для основных и диагональных направлений решетки. Коэффициенты  $G_{1-4} = G_0$  соответствуют основным направлениям решетки. Для трехмерной модели D3Q19 значения коэффициентов

для диагональных направлений  $G_k$ , обеспечивающие изотропность пространства, равны  $G_0 / 2$ , а  $\alpha = 3$ .

Хорошая изотропность аппроксимации (15) обеспечивает правильные значения поверхностного натяжения на границе раздела фаз и круглую форму капель жидкости в газе и паровых пузырей в жидкости в стационарном случае.

В работе [34] предложена модель с несколькими временами релаксации (multiple relaxation time, MRT) для моделирования многофазных течений методом решеточного уравнения Больцмана. Такая модель позволяет независимо задавать величины сдвиговой и объемной вязкости. Для повышения устойчивости предложено использовать параметр порядка, различающийся для жидкой и газообразной фазами. Используется выражение для силы межчастичного взаимодействия с первым порядком по скорости, что может быть одной из причин неустойчивостей. Рассмотрены некоторые тестовые задачи.

В работе [35] предложен метод решеточного уравнения Больцмана для моделирования бинарных смесей веществ с различным молекулярным весом. Вводятся силы межчастичного взаимодействия. Вектора скорости для разных веществ имеют разную длину, для восстановления значений функций распределения в узлах используется интерполяция.

В работе [36] моделируется рост кристалла из расплава при наличии течений расплава. В методе решеточного уравнения Больцмана используются два набора функций распределения, для расчета течения и для решения уравнения переноса тепла.

В работе [37] с помощью метода решеточного уравнения Больцмана моделируется образование структур при тепловой конвекции в двухкомпонентной среде с ограниченной взаимной растворимостью компонентов.

В работе [38] моделируется растворение твердых структур в многокомпонентной жидкости с помощью метода решеточного уравнения Больцмана.

В работе [39] предложена схема на основе решеточного уравнения Больцмана для моделирования бинарных смесей. Модель описывает смеси с разными числами Шмидта и произвольным отношением молекулярных масс компонентов. В гидродинамическом пределе восстанавливаются уравнения Навье – Стокса для



динамики сплошной среды и уравнения Стефана – Максвелла для взаимной диффузии.

В работе [40] предложена модель, основанная на методе решеточного уравнения Больцмана, для описания взаимодействия двухфазной среды с твердой стенкой. Аналитически выводится зависимость контактного угла от значений коэффициентов поверхностного натяжения газ–жидкость, газ–твердое тело и жидкость–твердое тело. Результаты моделирования сравниваются с теоретическими.

В работе [41] рассмотрено применение метода решеточного уравнения Больцмана к описанию реагирующих течений с быстрой химической кинетикой. Эволюция концентрации и температуры моделируется с помощью использования дополнительных наборов функций распределения. Рассчитывается горение смеси метана и кислорода в двумерном потоке.

В работе [42] предложен метод решеточного уравнения Больцмана для течений вязкой жидкости с переменной температурой и метод для моделирования двухфазных течений с отношением плотностей до 1000. Рассмотрено двухфазное течение в пористой структуре, столкновение двух капель и движение пузыря в жидкости.

В работе [43] предложен способ радикального уменьшения паразитных потоков, возникающих вблизи искривленных поверхностей в двухфазном методе решеточного уравнения Больцмана, а также способ независимо задавать уравнение состояния и коэффициент поверхностного натяжения. Вводится химический потенциал и несимметричная аппроксимация производных по пространству для разных направлений скоростей псевдочастиц. Недостатком метода является некоторое несохранение полной массы вещества.

В работе [44] рассмотрено использование различных уравнений состояния описывающих фазовый переход жидкость–пар в методе решеточного уравнения Больцмана. Из-за применения некорректных выражений для дискретизации сил межчастичного взаимодействия сделан неверный вывод о невозможности использования уравнения Ван-дер-Ваальса.

В работе [45] исследуются паразитные потоки, возникающие вблизи искривленных поверхностей раздела фаз при моделировании двухфазной среды методом решеточного уравнения Больцмана. Для уменьшения этих потоков

предлагается использовать шаблоны с большим количеством узлов для вычисления градиентов плотности. Учет действия силы выполняется не вполне корректным образом.

В работе [46] предложена двумерная модель для двухфазных течений, основанная на использовании дополнительного параметра порядка. Эволюция параметра порядка описывается уравнением Канна – Хилларда с учетом конвекции.

В работе [47] решеточное уравнение Больцмана используется для моделирования течений жидкости, переноса электрического заряда и тепла в электрогидродинамических течениях и на начальной стадии электрического пробоя.

В работе [48] предложен метод решеточного уравнения Больцмана для моделирования изотермических многокомпонентных смесей. Реализация состоит из двух подмоделей, одна из которых выбирается локально в зависимости от числа Шмидта для компонента смеси. В длинноволновом пределе метод описывает уравнение взаимной диффузии Максвелла – Стефана.

В работе [49] метод решеточного уравнения Больцмана, предложенный в 2005 г. в работе [35] для задачи конвекции–диффузии в двухкомпонентной смеси, обобщается на случай смеси трех веществ с различной молекулярной массой и коэффициентами взаимной диффузии. Рассмотрен способ реализации различных граничных условий (прилипание, проскальзывание, диффузное отражение). Результаты моделирования сравниваются с теоретическими.

В работе [50] предлагается вариант метода решеточного уравнения Больцмана для моделирования течений двух несмешивающихся жидкостей с различными плотностями и коэффициентами вязкости на основе метода градиента цвета. Моделируется двумерное течение Пуазейля стратифицированной жидкости, спинодальная декомпозиция смеси жидкостей с одинаковой плотностью и различными коэффициентами вязкости, коалесценция двух пузырьков.

В работе [51] предлагается использовать расширенные шаблоны при вычислении производных по пространству для улучшения изотропности и уменьшения паразитных потоков в двухфазном методе решеточного уравнения Больцмана. Также возможно независимо задавать уравнение состояния вещества и коэффициент поверхностного натяжения.

В работе [52] предложена модель на основе метода решеточного уравнения Больцмана для расчета теплопереноса в сверхкритических флюидах. Используется двухфазный метод на основе псевдопотенциалов с уравнением Ван-дер-Ваальса при температуре выше критической и дополнительный набор функций распределения для описания переноса энергии. Моделируется теплопроводность и возникновение конвекции при увеличении числа Рэлея.

В работе [53] сделана модификация метода псевдопотенциалов для моделирования с помощью решеточного уравнения Больцмана двухфазных течений. Исключенный объем учитывается в равновесных функциях распределения, притягивательная часть потенциала взаимодействия учитывается с помощью введения сил притяжения между узлами. Кривая сосуществования воспроизводится не слишком хорошо из-за использования некорректного метода учета силы. Паразитные потоки достаточно большие.

В работе [54] предлагается модель для течений с переменной температурой, основанная на методе решеточного уравнения Больцмана. Используется дополнительный набор функций распределения, описывающий перенос энтальпии с возможностью учета источников тепла. Моделируется плавление и затвердевания вещества в прямоугольной области, результаты сравниваются с экспериментом.

В работе [55] моделируется тепловая конвекция в вертикальном цилиндре при различных числах Рэлея. Используется метод решеточного уравнения Больцмана с двумя наборами функций распределения, для течения жидкости и для температуры. Результаты расчетов сравниваются с результатами, полученными другими методами.

В работе [56] исследуется течение жидкости и перенос тепла в системе коаксиально вращающихся диска и цилиндра. В методе решеточного уравнения Больцмана используются два набора функций распределения, для течения и для тепла. Результаты расчетов при разных числах Грасгофа и Рейнольдса сравниваются с результатами, полученными другими численными методами.

В работе [57] предложен способ моделирования реагирующих газовых смесей с помощью решеточного уравнения Больцмана и упрощенной реакционной кинетики. Вводятся функции распределения и уравнения эволюции для энтальпии и концентраций компонент смеси. Рассмотрено одномерное распространение фронта горения в смеси водорода и воздуха и двумерное течение такой реагирующей смеси.

В работе [11] предложен способ моделирования веществ с произвольным уравнением состояния (заданным в аналитической форме) с помощью метода решеточного уравнения Больцмана. За счет правильного согласования физических и модельных параметров, а также выбора дискретизации градиентов оказалось возможным значительно увеличить точность расчета равновесных плотностей жидкости и пара и получить большие отношения этих плотностей.

В работе [58] представлен гибридный метод на основе решеточного уравнения Больцмана с использованием свободной энергии и параметра порядка для моделирования двухкомпонентных смесей. Перенос и диффузия параметра порядка моделируется с помощью конечно-разностного метода. Показано уменьшение скоростей паразитных потоков.

В работе [59] многокомпонентная модель решеточного уравнения Больцмана с межчастичным взаимодействием выводится из кинетической теории. Полученная модель адекватно описывает обычную диффузию в соответствии с уравнениями Максвелла – Стефана и термодиффузию, в том числе на масштабах порядка длины свободного пробега.

В работе [60] с помощью метода решеточного уравнения Больцмана исследуется поведение системы реакция-диффузия (модель Грея – Скотта). Изучаются различные режимы, результаты расчетов сравниваются с теоретическими.

С помощью метода решеточного уравнения Больцмана в работе [29] [61] в двумерной постановке моделируется развитие неустойчивости Рэлея – Тейлора, сопряженной с экзотермической химической реакцией на фронте перемешивания. Измерялась скорость фронта при различных значениях турбулентного числа Дамкелера.

В работе [62] моделируется тепловая конвекция в кубической полости методом решеточного уравнения Больцмана. Используются два набора функций распределения, для описания течения жидкости и переноса тепла. Моделирование выполнено в приближении Буссинеска при различных числах Рэлея и Ричардсона.

В работе [63] метод решеточного уравнения Больцмана используется для моделирования течений жидкости и конвекции и диффузии пассивной примеси. Примесь описывается с помощью дополнительного набора функций распределения.

Особое внимание уделено граничным условиям. В двумерной постановке решаются задача о тепловой конвекции в прямоугольной полости при разных числах Рэлея и Прандтля, а также задача о течении Гейлора – Куэтта между двумя вращающимися цилиндрами.

В работе [12] предложен метод моделирования с помощью решеточного уравнения Больцмана течений веществ с произвольным уравнением состояния, заданном в табличном виде в областях стабильности жидкого и газообразного состояний. Описаны методы интерполяции изотерм в метастабильной и нестабильной областях. Проведены расчеты двухфазных течений реальных жидкостей с большим отношением плотностей жидкости и пара.

В работе [64] приведено краткое описание метода LBE и простые двумерные тесты.

## 1.2 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 [65] (далее используется сокращение MCA – movable cellular automata, введенное в зарубежной литературе).

Метод подвижных клеточных автоматов 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 МСА описывается уравнениями механики Ньютона – Эйлера.

Для поступательного движения частицы среды (подвижного клеточного автомата) уравнения имеют вид

$$m_i \frac{d^2 \vec{R}_i}{dt^2} = \vec{F}_i^\Omega + \sum_j \vec{F}_{ij}.$$

Здесь  $m_i$  – масса клеточного автомата с номером  $i$ ,  $\vec{R}_i$  – радиус-вектор центра масс МСА,  $\vec{F}_i^\Omega$  – суммарная объемная сила, действующая на  $i$  автомат,  $\vec{F}_{ij}$  – поверхностная сила, действующая на  $i$  автомат со стороны  $j$  автомата в месте их контакта.

Для вращательного движения клеточного автомата имеем

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

Здесь  $\hat{J}_i$  – тензор момента инерции  $i$  клеточного автомата,  $\vec{\theta}_i$  – вектор углов поворота,  $q_{ij}$  – 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.

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, ромбододекаэдром для ГЦК 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  $i$ .

При взаимодействии с  $j$  автоматом автомат  $i$  испытывает линейную деформацию, которая описывается формулой:

$$\xi_{ij} = (q_{ij} - r_i) / r_i ,$$

где  $r_i$  – радиус автомата  $i$ . Можно ввести понятие средней деформации автомата со стороны  $M$  соседей.

$$\bar{\xi}_i = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \xi_j = \frac{\Delta\Omega_i}{D \cdot \Omega_0} ,$$

где  $\Delta\Omega_i$  – изменение объема МСА вследствие деформации,  $\Omega_0$  – объем недеформированного автомата,  $D$  – размерность пространства.

Центральная сила, обусловленная деформацией частицы, равна

$$\vec{F}_i^\Omega = \sum_{i=1}^M P_j S_{ij} \vec{n}_{ij} ,$$

где  $P_j = -K_j (\Omega_j - \Omega_{0j}) / \Omega_{0j}$ .

Удельная 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  $G_i$  частицы  $i$ , по формуле:

$$p_{ij}^e = -2G_i (\xi_{ij} - \bar{\xi}_i)$$

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 центральная сила вязкого трения определяется величиной скорости тангенциального смещения в точке контакта автомата  $i$  и  $j$ .

$$p_{ij}^V = \eta_{ij}(\bar{v}_j - \bar{v}_i)\bar{n} / (q_{ij} + q_{ji})$$

В работе [66] выполнен анализ способов расчета сил при вращательных движениях объема деформируемой среды, состоящей из подвижных клеточных автоматов. Показано, что для описания вращений можно применять как метод явного расчета поворотов, при котором вращение считается степенью свободы каждого автомата, так и усредненный способ, описывающий вращение как специфическое согласованное движение элементов среды. Использование второго подхода моделирует в методе подвижных клеточных автоматов классическую упругую сплошную среду. В совокупности же с первым способом появляется возможность, в отличие от классических континуальных моделей, описывать среды, в которых каждая точка может обладать своим моментом вращения (так называемые микрополярные среды). Это важно, например, при описании деформаций гранулированных материалов. Кроме того, этот подход позволил авторам смоделировать распространение плоской и сферической волн продольных вращений, наблюдаемых в средах Коссера со стесненным вращением. Показано, что учет вращения автоматов необходим для правильного описания деформаций сдвига в материале.

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  $i$ :

$$\vec{\gamma}_{ij} = \int_0^t (\vec{\omega}_{ij} - \vec{\omega}_i) \times \vec{n}_{ij} dt.$$

Сила сопротивления сдвиговой деформации рассчитывается через скорости деформаций частиц  $i$  и  $j$  и соответствующих им модулей сдвига:

$$\vec{f}_{ij}^e = -(G_i \vec{\gamma}_{ij} + G_j \vec{\gamma}_{ji}) \times \vec{n}_{ij}.$$

Суммарный момент деформаций изгиба и кручения автоматов в паре удобно вычислять в одной формуле:

$$\vec{K}_{ij}^{rot} = -(G_i + G_j)(\vec{\theta}_j - \vec{\theta}_i).$$

Тангенциальная сила вязкого трения:



$$\vec{f}_{ij}^{\nu}(\vec{W}_{ij}) = -\eta_{ji} \frac{\vec{W}_{ij}}{r_{ij}},$$

где суммарная скорость тангенциального смещения пары автоматов в точке их контакта:

$$\vec{W}_{ij} = q_{ij}(\vec{\omega}_{ij} - \vec{\omega}_i) \times \vec{n}_{ij} + q_{ji}(\vec{\omega}_{ij} - \vec{\omega}_j) \times \vec{n}_{ij}.$$

В работе [67] реализован алгоритм вращения клеточного автомата, учитывающий осредненное движение соседей, для трехмерного случая. Там же разработаны методики анализа спектров упругих волн в среде, основанные на применении вейвлет-анализа. В частности показано, что изменение профиля трущихся поверхностей приводит к частотной модуляции упругих волн. На основе трехмерных расчетов авторы научились идентифицировать наноскопические поры в приповерхностных слоях материала на основе анализа изменения силы сопротивления трению скольжения наноскопического контртела.

Преимуществом метода подвижных клеточных автоматов является возможность его использования совместно с численными методами механики сплошной среды. Особенный интерес к этому методу вызывается возможностью моделирования композиционных материалов, сыпучих сред. В частности этот метод удобен в применении к задачам механики деформируемого твердого тела, в которых разрушение объекта сопровождается образованием большого количества границ и фрагментов.

В работах [25, 68, 69] развита методика, объединяющая в рамках единой концепции численные расчеты методом подвижных клеточных автоматов и макроскопическую феноменологическую теорию трения. В расчетах на мезоскопическом уровне совмещены метод подвижных клеточных автоматов и классические численные методы механики сплошных сред. При этом метод подвижных клеточных автоматов оказался наиболее эффективным при расчете участков контакта трущихся поверхностей, где нарушается сплошность среды, происходит разрушение и существенный массоперенос. Размеры таких областей  $\sim 100$  нм. В области упругих деформаций и там, где вероятность разрушения материала мала, удобно применять континуальные методы сплошной среды, которые позволяют описать процессы на масштабах от микронов до миллиметров и, к тому же, экономят вычислительные мощности, в частности, машинную память.

Помимо разрыва связей между соседними автоматами, имитирующего разрушение деформируемого материала, также учитывалась возможность формирования новых связей – процесс наносварки. Исследованы трибологические эффекты в области контакта хрупких материалов и пластически-деформируемых материалов. В [68] разработан метод анализа спектров упругих возмущений, возникающих в местах локального контакта поверхностей в процессе трения. Метод связывает характерные частоты этих волн с геометрией параметрами взаимодействия в зоне контакта.

В методе подвижных клеточных автоматов ключевую роль играет функция отклика материала автомата, которая описывает возникающие в материале напряжения в зависимости от деформаций. В базовой версии эта функция состоит из трех линейных отрезков, отвечающих упругой области деформации, линейному и параболическому упрочнению. В работе [70] на основе теоретико-полевого анализа процессов зарождения и распространения дефектов предложена динамическая функция отклика клеточного автомата, описывающая переход от упругой деформации к пластической со временем. В результате удается учесть изменение предела текучести материала с увеличением скорости деформации. Таким образом, в рамках единого подхода удастся описать экспериментальные диаграммы «напряжение-деформация» с площадкой текучести, зубом текучести и хрупким разрушением, реализуемых при разных скоростях нагружения материала.

На основе метода подвижных клеточных автоматов в работе [71] было показано, что при описании трения двух поверхностей со сложной топографией необходимо учитывать формирование слоя пластических деформаций, в котором происходит интенсивный массоперенос. Толщина этого слоя, по утверждению авторов, пропорциональна вязкости твердого тела и является основным параметром, влияющим на скорость износа материала в процессах трения.

Метод подвижных клеточных автоматов хорошо зарекомендовал себя и при исследовании механического поведения хрупких пористых сред, описывая систему от момента зарождения первых повреждений вплоть до разрушения [72].

В работах [73, 74] исследованы особенности деформации и разрушения хрупких пористых сред при одноосном сжатии и простом сдвиге для случаев регулярного и стохастического распределения пор в образце. Показано, что при регулярном расположении пор прочностные характеристики материалов выше, чем при их

хаотическом расположении. При этом порядок регулярного расположения пор также играет заметную роль. Полученные результаты согласуются с данными экспериментов по нагружению керамических материалов.

В работах [75, 76] на основе метода подвижных клеточных автоматов предложена иерархическая модель для описания деформации и разрушения наноструктурных пористых керамик при механическом напряжении. На микроуровне (размеры образцов  $\sim 100 - 200$  мкм) по результатам моделирования выбирается пористый образец (представительный объем) с заданными значениями эффективного модуля сжатия и прочности на сжатие. Функция отклика автомата на этих масштабах в численном эксперименте соответствовала диаграмме нагружения керамик на основе  $ZrO_2$  с пористостью 2%. Затем, происходит «укрупнение» масштаба: строится среда подвижных клеточных автоматов, каждый из которых обладает свойствами представительного объема. Для автоматов макроуровня используется функция отклика представительного объема на микроуровне, что позволило авторам осуществить перенос информации с микро на макроуровень. Эта процедура позволяет исследовать свойства пористых образцов размером  $\sim 1$  см.

Представляет интерес использование метода подвижных клеточных автоматов для исследования процессов в геологических средах, которые, по сути, обладают блочной структурой с низкими средними прочностными характеристиками на границах блоков по сравнению с самими блоками. В ряде работ [77-80] и др. изучено влияние напряженного состояния границ раздела блоков в геологических средах на их деформационный отклик при динамических воздействиях. Для математического описания упруго-пластического отклика границы раздела и блоков в рамках метода подвижных клеточных автоматов применялась модель изотропных упругопластических сред, построенная на основе деформационной теории пластичности с разгрузкой по упругому закону. Результаты показывают, что по изменению деформационного отклика межблочных границ на внешние воздействия можно оценить близость их напряженного состояния к критическому, при котором может возникнуть неустойчивая подвижка в тектонических разрывах. Таким образом, на основе подвижных клеточных автоматов предложен новый подход для оценки напряженно-деформированного состояния во фрагментах зон активных разломов земной коры.

Кроме описания разрушения материалов метод подвижных клеточных автоматов может оказаться полезным при решении инженерных задач [81]. В этой работе продемонстрирована возможность использования метода для описания деформаций стальных конструкций с учетом неустойчивостей и сопутствующих вибраций.

В моделях клеточных автоматов учитывается главным образом роль структурных факторов в процессах разрушения. Фазовые переходы, перестройка кристаллической структуры микрогранул материалов не принимаются во внимание, хотя они могут существенно изменить картину деформаций. Однако для описания медленных разрушений при не очень сильных нагрузках метод подвижных клеточных автоматов оказывается весьма эффективным.

Несмотря на эти недостатки, метод подвижных клеточных автоматов зарекомендовал себя как достаточно мощный инструмент для описания поведения твердых, в том числе и пористых сред, при статических и динамических нагрузках.

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 [23, 24].

Метод подвижных клеточных автоматов реализован в виде пакета программ для моделирования пластических деформаций, возникновения и распространения трещин, разрывов в гетерогенных материалах в 2D и 3D случаях [82].

В работе [83] выполнен анализ профиля программы расчета эволюции подвижных клеточных автоматов и показано, что основное время занимают вычисления сил и моментов, действующих на автомат. На втором месте по затратам оказался алгоритм поиска соседей, который выполняется на каждом шаге моделирования. Ускорение расчетов возможно, если реализовать вычисление сил между частицами параллельно. Авторы реализовали алгоритм параллельных вычислений на кластере с CPU. Использовалась технология MPI (Message Passing Interface – обмен данными посредством сообщений). Использовалась пространственная декомпозиция ансамбля автоматов по узлам кластера. При таком подходе выигрыш в производительности существенно зависит от числа частиц

(автоматов) данного узла, участвующих в обмене данными с частицами соседних узлами вычислительного кластера, т.е. от структуры деформируемого материала, способа разбиения частиц по узлам и характеристик связей (параметров взаимодействия) между автоматами. Авторами рассчитывалась эволюция ансамбля подвижных клеточных автоматов для трехмерной задачи в рамках модели мягких сфер (минимальное количество параметров взаимодействия между автоматами). Был получен максимальный выигрыш примерно в 23 раза для 40 узлов супер кластера СКИФ на ансамбле 360000 автоматов.

Насколько известно авторам настоящего проекта, реализации алгоритма метода подвижных клеточных автоматов на графических процессорах (GPU) для инженерных расчетов не существует. Учитывая, что в ближайшей перспективе вычислительные узлы современных кластеров будут строиться, по-видимому, с применением GPU, разработка соответствующего программного обеспечения является актуальной задачей.

### 1.3 Расчет теплопереноса в подвижной среде конечно-разностным методом

Нахождение численного решения систем гиперболических линейных и нелинейных уравнений, а также уравнений механики сплошной среды с доминирующим переносом, можно считать одной из фундаментальных проблем вычислительной математики. Известно [84], что классические алгоритмы первого порядка аппроксимации приводят к слишком большой диссипации, а классические схемы повышенного порядка в областях с большими градиентами приводят к нефизическим осцилляциям. Причина этого связана с так называемым «запретом Годунова», который показал [85], что не существует монотонных разностных схем с гладкими функциями численных потоков, повышенного порядка аппроксимации, т. е. имеющих порядок аппроксимации выше первого. Преодолеть этот запрет удалось путем введения в схемы специальных минимаксных процедур коррекции потоков, при которых даже при аппроксимации линейных гиперболических уравнений схема становится нелинейной. Впервые такие схемы были предложены отечественными авторами [86, 87], первые результаты зарубежных авторов по этой тематике были опубликованы в работах [88, 89]. Интересно отметить, что Брам Ван Лир, один из создателей модифицированных схем типа Годунова повышенной разрешимости на

разрывах, в статье [90], признавая приоритет Колгана в данном направлении, приводит и обсуждает результаты его работы [87].

В дальнейшем разностные схемы повышенной разрешимости на фронтах ударных волн, в основе которых лежат различные минимаксные процедуры коррекции потоков, активно развивались и в настоящее время представляют один из основных инструментов, используемых при численном моделировании самых разнообразных задач механики сплошной среды. Укажем только несколько основных работ, которые открывали целые новые направления в этой области: статья [91], в которой было введено понятие TVD схемы, т. е. схемы не увеличивающей при переходе с одного временного слоя на другой полную вариацию разностного решения; статья [92], в которой было введено понятие ENO схемы, как схемы «почти неосциллирующей»; статья [93], в которой было введено понятие NED схемы, как схемы не увеличивающей при переходе с одного временного слоя на другой число локальных экстремумов в разностном решении.

Достаточно долгое время преобладала точка зрения, что разностные схемы типа TVD, с повышенной точностью локализирующие ударные волны, сохраняют повышенный порядок сходимости во всех гладких частях рассчитываемых обобщенных решений. Однако в [94, 95] было показано, что эти схемы снижают свой порядок сходимости до первого и ниже в областях влияния нестационарных ударных волн и тем самым при расчете разрывных решений по существу схемами повышенной точности не являются. Основная причина такого снижения точности схем типа TVD [96] связана с тем, что (в отличие от классических немонотонных схем повышенной точности) в этих схемах происходит снижение гладкости функций численных потоков в результате процедур их минимаксной коррекции.

В результате постепенно стала преобладать противоположная точка зрения, сторонники которой утверждали, что построение разностных схем сквозного счета, сохраняющих повышенную точность в областях влияния нестационарных ударных волн в принципе невозможно. Однако в [97] на основе теории слабой аппроксимации была доказана принципиальная возможность построения таких схем и приведен конкретный пример немонотонной компактной разностной схемы третьего порядка аппроксимации на гладких решениях, которая имеет второй порядок локальной сходимости в области влияния нестационарной ударной волны. В связи с этим

возникает альтернатива в теории разностных схем сквозного счета: повышение разрешимости разностной схемы на разрывах приводит к снижению ее точности в областях влияния ударных волн и наоборот повышение точности в этих областях влечет за собой снижение точности при локализации разрывов, связанное с потерей монотонности разностного решения.

С учетом этих общих замечаний перейдем к обсуждению принципиально нового численного алгоритма, названного схемой КАБАРЕ, который активно развивается и начинает находить широкое применение в течении последних десяти лет. В [98] для численного решения уравнений одномерной газовой динамики [84] была предложена балансно характеристическая разностная схема, которая на классическом тесте “Blast Wave” [99] показала существенные преимущества по сравнению с известными монотонными схемами повышенной точности типа TVD. Предложенная схема имеет второй порядок аппроксимации на гладких решениях, является консервативной, явной, условно устойчивой в линейном приближении при числах Куранта  $r \in (0, 1]$ .

Основные достоинства этой схемы связаны с тем, что при аппроксимации линейного уравнения переноса, без учета нелинейной коррекции потоков, она эквивалентна трехслойной по времени схеме «кабаре» [100], которая является точной при двух различных числах Куранта  $r = 0.5$  и  $r = 1$ . В [101] балансно-характеристический метод, предложенный в [98] для случая массовых лагранжевых координат, был применен для численного моделирования разрывных решений уравнений одномерной газовой динамики в эйлеровых переменных. При этом сохранились все его достоинства, связанный с высокой точность локализации ударных волн, при отсутствии осцилляций на их фронтах.

В [102] исследуется монотонность схемы КАБАРЕ, относительно понятия монотонности, введенного в [85]. Показано, что при аппроксимации линейного уравнения переноса эта схема является монотонной при числах Куранта  $r \in (0, 0.5]$  и немонотонной при  $r \in (0.5, 1)$ . Предложен метод, обеспечивающий монотонность схемы КАБАРЕ для всех чисел Куранта  $r \in (0, 1]$ , при которых схема является устойчивой. В основе этого метода лежит двойная коррекция потоковых переменных, которая производится внутри одной пространственной ячейки

разностной сетки, что позволяет сохранить компактность пространственного шаблона исходной схемы.

В [103] на основе схемы КАБАРЕ был разработан численный алгоритм повышенной точности для математического моделирования просачивания влаги сквозь ненасыщенную трещиноватую геологическую среду с низкой проницаемостью. Эта задача возникла при анализе безопасности захоронения радиоактивных отходов и связана с моделированием протечек в водоненасыщенном пласте с малой проницаемостью. Многочисленные исследования показывают, что стандартные гомогенизированные модели приводят к качественно неверным результатам. Причиной таких отклонений может служить фрактальный характер сетей трещин, по которым происходит просачивание влаги, изменяющий сам характер осредненного закона Дарси.

Для того чтобы построить новые математические модели, адекватно учитывающие это обстоятельство, нужно использовать методологию вычислительного эксперимента высокой точности. Для этого нужно аккуратно решать обычные задачи просачивания в сильно неоднородной среде, представляющей собой набор конечного числа взаимодействующих перколяционных решеток в почти непроницаемой матрице. Проводящие элементы каждой решетки образуют кластеры, характер распределения которых является случайным. Взаимодействие между кластерами разных решеток осуществляется посредством капиллярных сил. Замыкающим элементом модели служит однородная слабопроницаемая матрица.

Разработанный в [103] алгоритм, позволяет решать уравнения просачивания на каждой из таких перколяционных решеток с учетом их взаимодействия друг с другом и с несущей слабопроницаемой матрицей. Приведенные результаты пространственно одномерных и двумерных расчетов демонстрируют высокую эффективность данного алгоритма. В [104] основное внимание уделяется теоретическим основам этой методики, связанной с численным моделированием стохастической адвекции в гетерогенных средах.

В [105] схема КАБАРЕ применяется для численного моделирования пространственно одномерных и двумерных задач аэроакустики. В первой части работы проведен детальный анализ диффузионных и дисперсионных свойств этой



схемы, демонстрирующий ее существенное преимущество по сравнению с традиционными конечно объемными схемами типа TVD. Во второй части работы приводится двухслойный по времени вариант схемы КАБАРЕ и соответствующая ему методика коррекции потоков, основанная на применении принципа максимума. В третьей части приведены результаты численного моделирования конкретных акустических задач, иллюстрирующую высокую точность локализации особенностей точного решения на основе предложенного алгоритма.

В [106] схема КАБАРЕ применяется для численного моделирования пространственно двумерных вихревых океанических течений на основе линейного приближения уравнений мелкой воды. В [107] приводится детальное описание преимуществ пространственно-одномерного варианта схемы КАБАРЕ по сравнению с другими известными алгоритмами типа TVD. В [108] на основе схемы КАБАРЕ в одномерном и двумерном случаях проводится прямое надсеточное моделирование однородной изотропной турбулентности. В [109] эта схема применяется для расчетов двумерных течений несжимаемой жидкости в переменных «функция тока – завихренность».

#### 1.4 Применение графических процессоров для параллельных вычислений

Впервые GPU были использованы для моделирования методом LBE в работе [27]. Однако до настоящего времени параллельные вычисления на одной или нескольких видеокартах применялись только для простых вариантов метода LBE без фазовых переходов [27, 110-112].

У исполнителей проекта есть успешный опыт распараллеливания метода LBE с учетом фазовых переходов на многоядерных графических ускорителях фирмы nVIDIA [113, 114].

Для распараллеливания алгоритма на большое количество ядер использовалась технология программирования CUDA (Compute Unified Device Architecture) {CUDA}. При этом для варианта метода LBE с фазовыми переходами ускорение нашего алгоритма для GTX-580 составляло до 70-90 раз при вычислениях с двойной точностью по сравнению с одним ядром процессора Intel Core 2 Duo с частотой 3.3 ГГц [113, 114]. При этом производительность одного графического процессора GTX-

580 для трехмерной модели LBE с фазовыми переходами составляет ~100 миллионов узлов сетки в секунду.

В работе [116] представлена реализация метода решеточного уравнения Больцмана для ускорителя Cell. Исследуется точность расчетов для различной топологии течения и граничных условий в диапазоне чисел Рейнольдса 6–350. В многопроцессорных конфигурациях получена производительность 28 GFlops на один процессор Cell.

В работе [110] представлена реализация трехмерного метода решеточного уравнения Больцмана на графических устройствах с использованием технологии NVidia CUDA. Получено повышение скорости вычислений на два порядка по сравнению с расчетами на CPU.

В работе [117] с помощью метода решеточного уравнения Больцмана моделируется сдвиговое течение эмульсий. Метод реализован на графическом процессоре NVidia Tesla 1060. Исследуются затраты времени на каждый этап расчета. Получено ускорение по сравнению с расчетами на CPU от 2 до 12 раз.

В работе [118] рассмотрена параллельная реализация расчета парных межчастичных взаимодействий в методе молекулярной динамики при нулевых граничных условиях на графических процессорах. Предложены примеры оптимизации кода. Достигнуто ускорение до 660 раз по сравнению со скалярной версией.

В работе [119] описана реализация трехмерного метода решеточного уравнения Больцмана на графических ускорителях с использованием технологии NVidia CUDA. Описан метод оптимизации доступа к графической памяти. Сравняется производительность на различных обычных и графических процессорах.

В работе [120] представлена эффективная реализация двумерного метода решеточного уравнения Больцмана с использованием технологии NVidia CUDA. Обсуждаются способы достижения максимальной производительности.

В работе [121] выполнен обзор истории развития аппаратного и программного обеспечения для проведения расчетов на графических устройствах. Описания технологии CUDA. Примеры расчетов и достигнутых уровней производительности.

В работе [122] представлена реализация двумерного метода решеточного уравнения Больцмана, работающая на графических устройствах NVidia. Рассмотрено

течение в каверне при числе Рейнольдса 1000. Расчеты проводились на графической карте GT 200. При использовании арифметики с одинарной точностью удалось достигнуть результата в 915 MNUPS (миллионов обновлений узлов в секунду), с двойной точностью – 256 MNUPS. Заявлено, что одинарная точность обеспечивает приемлемую аккуратность.

В работе [123] рассмотрены основы применения технологии NVidia CUDA для распараллеливания вычислений с использованием графических процессоров. Обсуждаются основы программной реализации технологии.

В работе [124] приведено описание гибридного суперкомпьютера, состоящего из шести узлов. Каждый узел содержит два четырехядерных процессора AMD Opteron и один двухчиповый графический ускоритель NVidia GTX 295. Численно решается задача об обтекании препятствия сверхзвуковым потоком с помощью использования квазигазодинамической системы уравнения (уравнения Навье – Стокса с дополнительными релаксационными членами). Преимущество графических ускорителей увеличивается с ростом количества ячеек сетки в одном блоке и достигает 4.5 раза по сравнению с расчетами на CPU.

В работе [125] моделируются двумерные течения разреженного газа с помощью NVidia CUDA. Решается уравнение Больцмана (непрерывное) для двух моделей молекулярного потенциала – модели твердых сфер и потенциала Леннарда – Джонса. Рассмотрено течение в каверне и распространение ударной волны в узком канале. Ускорение расчетов при использовании NVidia GTX 285 по сравнению с одним ядром Intel Core Quad 2.66 GHz составило 135 раз (течение в каверне) и 74 раза (распространение ударной волны).

В работе [111] рассматривается метод моделирования течений со свободной границей, основанный на методе решеточного уравнения Больцмана и метода объемов жидкости (volume-of-fluid, VOF). Использовались NVidia GTX 275 и NVidia Tesla C1060. В задаче разрушения плотины достигнута производительность 358 MNUPs (миллион узлов в секунду), в задаче о гидравлическом прыжке – 130 MNUPs. Также рассмотрена задача об ударе волны о цилиндр.

В работе [126] рассматриваются способы оптимизации трехмерного метода решеточного уравнения Больцмана на графических устройствах NVidia GT 200. Оптимизируются арифметические операции и организация данных для ускорения и

уменьшения числа обращений к памяти. Достигнута производительность до 86% от максимального теоретического значения.

В работе [127] представлены две реализации метода решеточного уравнения Больцмана на неоднородных сетках: для многоядерных CPU и для графических устройств. Исследуется производительность в двумерной задаче об обтекании цилиндра в канале несжимаемым и сжимаемым потоком. Показано, что производительность ограничивается скоростью доступа к памяти.

В работе [112] рассмотрена реализация трехмерного метода решеточного уравнения Больцмана для решения задач течения сплошной среды с большими числами Рейнольдса на нескольких GPU, работающих параллельно. Использовалось до шести графических устройств, получен практически линейный рост производительности и эффективность параллелизации не хуже 90%.

## 2 ИССЛЕДОВАНИЕ 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.

Основная идея метода LBE заключается в том, что для описания гидродинамических течений в кинетическом уравнении Больцмана достаточно использовать дискретный конечный набор скоростей частиц (кинетическое уравнение Больцмана с дискретными скоростями). Это приближение может быть обосновано тем, что на гидродинамическом этапе эволюции динамических систем частиц, когда время больше времени свободного пробега, в малых объемах устанавливается локальное равновесие и даже знание одночастичной функции распределения излишне. В этом случае достаточно знать несколько первых моментов функции распределения. Поэтому можно ограничиться простой модельной системой с дискретным набором скоростей частиц, для которой значения моментов функции распределения согласованы с гидродинамическими величинами: плотностью, импульсом, энергией. Обоснованием этого метода можно считать тот факт, что во втором порядке разложения Чепмена – Энскога из уравнений LBE

получаются уравнения гидродинамики, то есть уравнения неразрывности и Навье – Стокса.

Метод подвижных клеточных автоматов 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). Преимуществом метода подвижных клеточных автоматов является возможность его использования совместно с численными методами механики сплошной среды. Особенный интерес к этому методу вызывается возможностью моделирования композиционных материалов, сыпучих сред. В частности этот метод удобен в применении к задачам механики деформируемого твердого тела.

### 3 ВЫБОР НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ

Для численного моделирования многокомпонентной гидродинамики выбран метод решеточных уравнений Больцмана для многокомпонентных смесей. Каждый из компонентов описывается своим комплектом одночастичных функций распределения.

Для численного моделирования фазовых переходов жидкость–пар выбран метод решеточных уравнений Больцмана на основе псевдопотенциала, зависящего от уравнения состояния.

Для двумерных задач выбран вариант метода LBE с девятью векторами скорости – D2Q9. Для трехмерных задач выбран вариант метода LBE с девятнадцатью векторами скорости – D3Q19.

Для скалярного уравнения переноса тепла в движущейся жидкости выбрано два метода: конечно-разностный метод КАБАРЕ и метод LBE для переноса пассивной примеси.

Для численного моделирования динамических задач механики деформируемого твердого тела выбран метод подвижных клеточных автоматов, разработанный в Институте физики прочности и материаловедения СО РАН.

Для обеспечения мультиплатформенности (использование операционных систем Windows и Linux) выбран gcc компилятор языка C++.

Выбраны алгоритмы указанных методов, 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.

В качестве графических процессоров выбраны видеокарты фирмы NVIDIA.

Для распараллеливания алгоритма на большое количество ядер графических процессоров фирмы NVIDIA выбрана технология программирования CUDA (Compute Unified Device Architecture).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в результате выполнения первого этапа работы выбраны направления исследований по программной реализации метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов.

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.

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).

Таким образом, в результате выполнения первого этапа работы выбраны направления исследований и проведены следующие работы:

- 1) Аналитический обзор информационных источников по методу решеточных уравнений Больцмана, включая моделирование многокомпонентных и многофазных сред, методу подвижных клеточных автоматов и их реализациям на современных графических процессорах.
- 2) Исследование объекта НИР.
- 3) Патентные исследования в соответствии ГОСТ Р 15.011-96.
- 4) Выбор направления исследований.
- 5) Проведен нормоконтроль Отчета о НИР на соответствие ГОСТ 7.32-2001.

Научные результаты работы, полученные на данном этапе НИР, будут внедрены (использованы) на последующих этапах НИР при разработке Экспериментального образца программных реализаций разработанных методов. Внедрение результатов (разрабатываемых алгоритмов и методов моделирования) в инженерную практику возможно только после окончания НИР. Экономической эффективности результаты НИР на данном этапе исследований иметь не могут.

## 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 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.
- 4 Qian Y. H., Chen S. Finite size effect in lattice-BGK models // *International Journal of Modern Physics C*. 1997. Vol. 8, N 4. 763–771.
- 5 Zhang R., Chen H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows // *Phys. Rev. E*. 2003. Vol. 67, N 6. P. 066711.
- 6 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.
- 7 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.
- 8 Kupershtokh A. L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // *Computers and Mathematics with Applications*. 2010. Vol. 59, N 7. 2236–2245.
- 9 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.
- 10 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.
- 11 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.



- 12 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.
- 13 Kupershtokh A. L., Medvedev D. A. Anisotropic instability of a dielectric liquid in a strong uniform electric field: Decay into a two-phase system of vapor filaments in a liquid // *Phys. Rev. E*. 2006. Vol. 74, N 2. P. 021505(5).
- 14 Kupershtokh A. L., Medvedev D. A. Lattice Boltzmann equation method in electrohydrodynamic problems // *J. Electrostatics*. 2006. Vol. 64, N 7/9. P. 581–585.
- 15 Куперштох А. Л., Медведев Д. А. Электрогидродинамическая неустойчивость жидких диэлектриков в сильных электрических полях и распад на анизотропную двухфазную систему жидкость-пар // *Доклады Академии наук*. 2006. Т. 411, № 6. С. 766–769.
- 16 Medvedev D. A., Fischakeck T., Kassner K. Influence of external flows on crystal growth: Numerical investigation // *Phys. Rev. E*. 2006. Vol. 74, N 3. P. 031606(10).
- 17 Medvedev D. A. Lattice Boltzmann model for simulation of the electric breakdown in liquids // *Procedia Computer Science*. 2010. Vol. 1, N 1. P. 811–818.
- 18 Куперштох А. Л. Метод решеточных уравнений Больцмана для моделирования двухфазных систем типа жидкость-пар // *Современная наука*. 2010. Т. 4, № 2. С. 56–63.
- 19 Куперштох А. Л. Моделирование анизотропного распада бинарных смесей типа жидкость-растворенный газ в сильных электрических полях методом решеточных уравнений Больцмана // *Труды Международной конференции "Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика"*, посвященной 90-летию со дня рождения академика Н.Н. Яненко (Новосибирск, Россия, 30 мая - 4 июня 2011 г.). – No. гос. регистр. 0321101160, ФГУП НТЦ "Информрегистр". – Новосибирск. – 2011. – <http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/38293/46446/Kupershtokh.pdf> .
- 20 Joshi A. S., Sun Y. Multiphase lattice Boltzmann method for particle suspensions // *Phys. Rev. E*. 2009. Vol. 79, N 6. P. 066703(16).
- 21 Markus A., Hazi G. Simulation of evaporation by an extension of pseudopotential lattice Boltzmann method: A quantitative analysis // *Phys. Rev. E*. 2011. Vol. 83, N 4.

- P. 046705(10).
- 22 Huang H., Krafczyk M., Lu X. Forcing term in single-phase and Shan-Chen-type multiphase lattice Boltzmann models // *Phys. Rev. E*. 2011. Vol. 84, N 4. P. 046710(15).
  - 23 Псахье С. Г., Коростелев С. Ю., Смолин А. Ю., Дмитриев А. И., Шилько Е. В., Моисеенко Д. Д., Татаринцев Е. М., Алексеев С. В. Метод подвижных клеточных автоматов как инструмент физической мезомеханики материалов // *Физическая мезомеханика*. 1998. Т. 1, № 1. С. 95–108.
  - 24 Псахье С. Г., Остермайер Г. П., Дмитриев А. И., Шилько Е. В., Смолин А. Ю., Коростелев С. Ю. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. I. Теоретическое описание // *Физическая мезомеханика*. 2000. Т. 3, № 2. С. 5–13.
  - 25 Псахье С. Г., Смолин А. Ю., Стефанов Ю. П., Макаров П. В., Чертов М. А. Моделирование поведения сложных сред на основе совместного использования дискретного и континуального подходов // *Письма в ЖТФ*. 2004. Т. 30, вып. 17. С. 7–13.
  - 26 Псахье С. Г., Чертов М. А., Шилько Е. В. Интерпретация параметров метода подвижных клеточных автоматов на основе перехода к континуальному описанию // *Физическая мезомеханика*. 2000. Т. 3, № 3. С. 93–96.
  - 27 Li W., Wei X., Kaufman A. Implementing lattice Boltzmann computation on graphics hardware // *Visual Computer*. 2003. Vol. 19. P. 444–456.
  - 28 Broadwell J. E. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method // *J. Fluid Mech.* 1964. Vol. 19, N 3. P. 401–414.
  - 29 Qian Y. H., Orzag S. A. Lattice BGK models for the Navier – Stokes equation: Nonlinear deviation in compressible regimes // *Europhys. Lett.* 1993. Vol. 21, N 3. P. 255–259.
  - 30 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.
  - 31 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.
  - 32 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.
- 33 Chen S., Doolen G. D. Lattice Boltzmann method for fluid flow // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998. Vol. 30. P. 329–364.
  - 34 McCracken M. E., Abraham J. Multiple-relaxation-time lattice-Boltzmann model for multiphase flow // *Physical Review E.* 2005. Vol. 71, N 3. P. 036701.
  - 35 McCracken M. E., Abraham J. Lattice Boltzmann method for binary mixtures with different molecular weights // *Physical Review E.* 2005. Vol. 71, N 4. P. 046704.
  - 36 Medvedev D., Kassner K. Lattice Boltzmann scheme for crystal growth in external fluid // *Physical Review E.* 2005. Vol. 72, N 5. P. 056703.
  - 37 Pooley C. M., Kuksenok O., Balazs A. C. Convection-driven pattern formation in phase-separating binary fluids // *Physical Review E.* 2005. Vol. 71, N 3. P. 030501.
  - 38 Verhaeghe F., Arnout S., Blanpain B., Wollants P. Lattice Boltzmann model for diffusion-controlled dissolution of solid structures in multicomponent liquids // *Physical Review E.* 2005. Vol. 72, N 3. P. 036308.
  - 39 Archidiacono S., Mantzaras J., Ansumali S., Karlin I. V., Frouzakis C., Boulouchos K. B. Simulation of binary mixtures with the lattice Boltzmann method // *Physical Review E.* 2006. Vol. 74, N 5. P. 056707.
  - 40 Benzi R., Biferale L., Sbragaglia M., Succi S., Toschi F. Mesoscopic modeling of a two-phase flow in the presence of boundaries: The contact angle // *Physical Review E.* 2006. Vol. 74, N 2. P. 021509.
  - 41 Chen S., Liu Z.-H., He Z., Zhang C., Tian Z.-W., Shi B.-C., Zheng C.-G. A novel lattice Boltzmann model for reactive flows with fast chemistry // *Chinese Physics Letters.* 2006. Vol. 23, N 3. P. 656–659.
  - 42 Inamuro T. Lattice Boltzmann method for viscous fluid flows and for two-phase fluid flows // *Fluid Dynamics Research.* 2006. Vol. 38, N 9. P. 641–659.
  - 43 Lee T., Fischer P. F. Eliminating parasitic currents in the lattice Boltzmann equation method for nonideal gases // *Physical Review E.* 2006. Vol. 74, N 4. P. 046709.
  - 44 Peng Y., Schaefer L. Equations of state in a lattice Boltzmann method // *Physics of Fluids.* 2006. Vol. 18, N 4. P. 042101.

- 45 Shan X. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models // *Physical Review E*. 2006. Vol. 73, N 4. P. 047701.
- 46 Zheng H. W., Shu C., Chew Y. T. A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio // *Journal of Computational Physics*. 2006. Vol. 218, N 1. P. 353–371.
- 47 Медведев Д. А., Куперштох А. Л. Мезоскопическое моделирование электрогидродинамических течений // *Физическая мезомеханика*. 2006. Т. 9, № 2. С. 27–35.
- 48 Arcidiacono S., Karlin I. V., Mantzaras J., Frouzakis C. E. Lattice Boltzmann model for the simulation of multicomponent mixtures // *Physical Review E*. 2007. Vol. 76, N 4. P. 046703.
- 49 Joshi A. S., Peracchio A. A., Grew K. N., Chiu W. K. S. Lattice Boltzmann method for continuum, multi-component mass diffusion in complex 2D geometries // *Journal of Physics D*. 2007. Vol. 40, N 9. P. 2961–2971.
- 50 Reis T., Phillips T. N. Lattice Boltzmann model for simulating immiscible two-phase flows // *Journal of Physics A*. 2007. Vol. 40, N 14. P. 4033–4053.
- 51 Sbragaglia M., Benzi R., Biferale L., Succi S., Sugiyama K., Toschi F. Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential // *Physical Review E*. 2007. Vol. 75, N 2. P. 026702.
- 52 Házi G., Márkus A. Modeling heat transfer in supercritical fluid using the lattice Boltzmann method // *Physical Review E*. 2007. Vol. 77, N 2. P. 026305.
- 53 Zhang J., Tian F. A bottom-up approach to non-ideal fluids in the lattice Boltzmann method // *Europhysics Letters*. 2008. Vol. 81, N 6. P. 66005.
- 54 Chatterjee D. An enthalpy-based thermal lattice Boltzmann model for non-isothermal systems // *Europhysics Letters*. 2009. Vol. 86, N 1. P. 14004.
- 55 Chen S., Tölke J., Krafczyk M. Simulation of buoyancy-driven flows in a vertical cylinder using a simple lattice Boltzmann model // *Physical Review E*. 2009. Vol. 79, N 1. P. 016704.
- 56 Chen S., Tölke J., Krafczyk M. Numerical simulation of fluid flow and heat transfer inside a rotating disk-cylinder configuration by a lattice Boltzmann model // *Physical Review E*. 2009. Vol. 80, N 1. P. 016702.

- 57 Chiavazzo E., Karlin I. V., Gorban A. N., Boulouchos K. Combustion simulation via lattice Boltzmann and reduced chemical kinetics // *Journal of Statistical Mechanics*. 2009. N 6. P. P06013.
- 58 Tiribocchi A., Stella N., Gonella G., Lamura A. Hybrid lattice Boltzmann model for binary fluid mixtures // *Physical Review E*. 2009. Vol. 80, N 2. P. 026701.
- 59 Shan X. Multicomponent lattice Boltzmann model from continuum kinetic theory // *Physical Review E*. 2010. Vol. 81, N 4. P. 045701(R).
- 60 Ayodele S., Varnik F., Raabe D. Lattice Boltzmann study of pattern formation in reaction-diffusion systems // *Physical Review E*. 2011. Vol. 83, N 1. P. 016702.
- 61 Biferale L., Mantovani F., Sbragaglia M., Scagliarini A., Toschi F., Tripiccione R. Reactive Rayleigh–Taylor systems: Front propagation and non-stationarity // *Europhysics Letters*. 2011. Vol. 94, N 5. P. 54004.
- 62 Du H.-Y., Chai Z.-H., Shi B.-C. Lattice Boltzmann study of mixed convection in a cubic cavity // *Communications in Theoretical Physics*. 2011. Vol. 56, N 1. P. 144–150.
- 63 Huang H.-B., Lu X.-Y., Sukop M. C. Numerical study of lattice Boltzmann methods for a convection–diffusion equation coupled with Navier–Stokes equations // *Journal of Physics A*. 2011. Vol. 44, N 5. P. 055001.
- 64 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.
- 65 Псахье С. Г., Хори Я., Коростелев С. Ю., Смолин А. Ю., Дмитриев А. И., Шилько Е. В., Алексеев С. В. Метод подвижных клеточных автоматов как инструмент для моделирования в рамках физической мезомеханики // *Изв. вузов. Физика*. 1995. Т. 38, №11. С. 58–69.
- 66 Смолин А. Ю., Роман Н. В., Добрынин С. А., Псахье С. Г. О вращательном движении в методе подвижных клеточных автоматов // *Физическая мезомеханика*. 2009. Т. 12, № 2, с.17–22.
- 67 Добрынин С. А. Развитие метода подвижных клеточных автоматов для моделирования генерации и распространения упругих волн при контактном взаимодействии твердых тел // *Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук, Томск*, 2009. – 20 с.

- 68 Смолин А. Ю., Коноваленко Иг. С., Псахье С. Г. О возможности идентификации упругих волн, генерируемых в зоне контакта пары трения // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33, вып. 14. С. 34–41.
- 69 Дмитриев А. И., Смолин А. Ю., Попов В. Л., Псахье С. Г. Многоуровневое моделирование процессов трения и износа на основе численных методов дискретной механики и феноменологической теории // Физическая мезомеханика, 2008. Т. 11, № 4. С. 15–24.
- 70 Чертов М. А., Чертова Н. В., Гриняев Ю. В., Смолин А. Ю., Псахье С. Г. Динамическая функция отклика в методе подвижных клеточных автоматов, построенная на основе калибровочной модели однородно-деформируемого материала с дефектами // Физическая мезомеханика. 2005. Т. 8, № 4. С. 59–67.
- 71 Popov V. L., Psakhie S. G. Physical nature and properties of dynamic surface layers in friction // Tribology International. 2006. Vol. 39, N 5. P. 426–430.
- 72 Коноваленко Иг. С. Теоретическое исследование деформации и разрушения пористых материалов медицинского назначения и биомеханических конструкций: дис. ... канд. физ.-мат. наук. Томск, 2007. – 174 с.
- 73 Смолин А. Ю., Коноваленко Иг. С., Кульков С. Н., Псахье С. Г. О возможности квазивязкого разрушения хрупких сред со стохастическим распределением пор // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32, вып. 17. С. 7–14.
- 74 Коноваленко Иг. С., Смолин А. Ю., Роман Н. В., Псахье С. Г. Численное исследование особенностей деформации и разрушения хрупких пористых сред на основе метода подвижных клеточных автоматов // Труды Международной конференции "Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика", посвященной 90-летию со дня рождения академика Н.Н. Яненко (Новосибирск, Россия, 30 мая - 4 июня 2011 г.). – No. гос. регистр. 0321101160, ФГУП НТЦ "Информрегистр". – Новосибирск. – 2011. – [http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/38614/47717/Konovalenko\\_Ig\\_S\\_2.pdf](http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/38614/47717/Konovalenko_Ig_S_2.pdf)
- 75 Коноваленко Иг. С., Смолин А. Ю., Псахье С. Г. Многоуровневое моделирование деформации и разрушения хрупких пористых материалов на основе метода подвижных клеточных автоматов // Физическая мезомеханика. 2009. Т. 12, № 5. С. 29–36.

- 76 Коноваленко Иг. С., Смолин А. Ю., Никонов А. Ю., Псахье С. Г. Многоуровневое моделирование деформации и разрушения хрупких пористых материалов на основе метода подвижных клеточных автоматов // Труды Международной конференции "Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика", посвященной 90-летию со дня рождения академика Н.Н. Яненко (Новосибирск, Россия, 30 мая - 4 июня 2011 г.). – No. гос. регистр. 0321101160, ФГУП НТЦ "Информрегистр". – Новосибирск. – 2011. – [http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/38639/47552/Konovalenko\\_Ig\\_S\\_1.pdf](http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/38639/47552/Konovalenko_Ig_S_1.pdf)
- 77 Астафуров С. В., Шилько Е. В., Ружич В. В., Псахье С. Г. Изучение влияния напряженного состояния блочных сред на характер отклика активных границ раздела при вибрационных воздействиях // Физическая мезомеханика. 2005. Т.8, № 4. С. 69–75.
- 78 Psakhie S. G., Ruzhich V. V., Shilko E. V., Popov V. L., Astafurov S. V. A new way to manage displacements in zones of active faults // Tribology International. 2007. Vol. 40. P. 995–1003.
- 79 Астафуров С. В., Шилько Е. В., Ружич В. В., Псахье С. Г. Исследование влияния локального напряженного состояния границ раздела блоков геологических сред на их отклик при динамических воздействиях // Геология и геофизика. 2008. Т. 49, № 1. С. 67–77.
- 80 Астафуров С. В., Григорьев А. С., Псахье С. Г., Шилько Е. В. Развитие нового подхода к оценке уровня сдвиговых напряжений на активных границах раздела блочных геологических сред // Труды Международной конференции "Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика", посвященной 90-летию со дня рождения академика Н.Н. Яненко (Новосибирск, Россия, 30 мая - 4 июня 2011 г.). – No. гос. регистр. 0321101160, ФГУП НТЦ "Информрегистр". – Новосибирск. – 2011. – [http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/37630/44274/astafurov\\_extended\\_abstract.pdf](http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/37630/44274/astafurov_extended_abstract.pdf)
- 81 Huang D. W., Wang M., Psakhie S. G. Simulation of the vibration response of a column under the post-buckling behavior by particle mechanics method // Computational Materials Science. 2010. V. 48. P. 310–316.

- 82 Программа для моделирования материалов в дискретно-континуальном подходе «FEM+МСА»: Номер государственной регистрации в ОФАП: 50208802297 / Смолин А. Ю., Зелепугин С. А., Добрынин С. А.; заявитель и организация-разработчик – ГОУ ВПО Томский государственный университет. – зарег. 28.11.08; свидетельство ОФАП № 11826 от 01.12.08 г.
- 83 Коростылев С. Ю, Смолин А. Ю, Псахье С. Г. Параллельные вычисления для метода подвижных клеточных автоматов. // Труды Международной конференции "Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика", посвященной 90-летию со дня рождения академика Н.Н. Яненко (Новосибирск, Россия, 30 мая - 4 июня 2011 г.). - No. гос. регистр. 0321101160, ФГУП НТЦ "Информрегистр". - Новосибирск. - 2011. <http://conf.nsc.ru/files/conferences/niknik-90/fulltext/39709/46766/Korostelev.pdf>
- 84 Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. – М.: Физматлит, 2001.
- 85 Годунов С. К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Матем. Сборник. 1959. Т. 47, № 3. С. 271–306.
- 86 Гольдин В. Я., Калиткин Н. Н., Шишова Т. В. Нелинейные разностные схемы для гиперболических уравнений // Ж. Вычисл. Матем. и Матем. Физ. 1965. Т. 5, № 5. С. 938–944.
- 87 Колган В. П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечноразностных схем для расчёта разрывных решений газовой динамики // Учёные записки ЦАГИ. 1972. Т. 3, № 6. С. 68–77.
- 88 Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. I. The quest of monotonicity // Lecture Notes in Physics. 1973. Vol. 18, N 1. P. 163–168.
- 89 Boris J. P., Book D. L. Flux-corrected transport. I: SHASTA, a fluid-transport algorithm that works // J. Comput. Phys. 1973. Vol. 11, N 1. P. 38–69.
- 90 Van Leer B. A historical oversight: Vladimir P. Kolgan and his high-resolution scheme // J. Comput. Phys. 2011. Vol. 230, N 7. P. 2378–2383.
- 91 Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // J. Comp. Phys. 1983. Vol. 49, N 3. P. 357–393.
- 92 Harten A., Osher S. Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes // SIAM J. Numer. Anal. 1987. Vol. 24, N 2. P. 279–309.
- 93 Nessyahu H. and Tadmor E. Non-oscillatory central differencing for hyperbolic



- conservation laws // *J. Comp. Phys.* 1990. Vol. 87, N 2. P. 408–464.
- 94 Остапенко В. В. О сходимости разностных схем за фронтом нестационарной ударной волны // *Ж. Вычисл. Матем. и Матем. Физ.* 1997. Т. 37, № 10. С. 1201–1212.
- 95 Casper J., Carpenter M. H. Computational consideration for the simulation of shock-induced sound // *SIAM J. Sci. Comput.* 1998. Vol. 19, N 4. P. 813–828.
- 96 Ковыркина О. А., Остапенко В. В. О сходимости разностных схем сквозного счета // *ДАН.* 2010. Т. 433, № 5. С. 599–603.
- 97 Остапенко В. В. О построении разностных схем повышенной точности для сквозного расчета нестационарных ударных волн // *Ж. Вычисл. Матем. и Матем. Физ.* 2000. Т. 40, № 12. С. 1857–1874.
- 98 Головизнин В.М. Балансно-характеристический метод численного решения уравнений газовой динамики // *ДАН.* 2005. Т. 403, № 4. С. 1–6.
- 99 Woodward P., Colella P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks // *J. Comp. Phys.* 1984. Vol. 54, N 1. P. 115–173.
- 100 Головизнин В. М., Самарский А. А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // *Матем. Моделирование.* 1998. Т. 10, № 1. С. 86–100.
- 101 Головизнин В. М. Балансно-характеристический метод численного решения одномерных уравнений газовой динамики в эйлеровых переменных // *Матем. моделирование.* 2006. Т. 18, № 11. С. 14–30.
- 102 Остапенко В. В. О монотонности балансно-характеристической схемы // *Матем. моделирование.* 2009. Т. 21, № 7. С. 29–42.
- 103 Головизнин В. М., Семенов В. Н., Канаев А. А., Кондаков В. Г., Короткин И. А. Новый вычислительный алгоритм для математического моделирования просачивания влаги сквозь ненасыщенную трещиноватую геологическую среду с низкой проницаемостью // *Препринт № IBRAE-2006-07, Москва: ИБРАЭ РАН, 2006. – 53 с.*
- 104 Goloviznin V. M., Semenov B. N., Korotkin N. A., Karabasov S. A. A novel computational method for modelling stochastic advection in heterogeneous media // *Transp. Porous Med.* 2007. Vol. 66, N 2. P. 439–456.
- 105 Karabasov S. A., Goloviznin V. M. New efficient high-resolution method for

- nonlinear problems in aeroacoustics // AIAA J. 2007. Vol. 45, N 12. P. 2861–2871.
- 106 Karabasov S. A., Berloff P. S., Goloviznin V. M. Cabaret in the ocean gyres // Ocean Modelling. 2009. Vol. 30, N 2. P. 155–168.
- 107 Karabasov S. A., Goloviznin V. M. Compact accurately boundary-adjusting high-resolution technique for fluid dynamics // J. Comp. Phys. 2009. Vol. 228, N 19. P. 7426–7451.
- 108 Головизнин В. М., Карабасов С. А., Короткин И. А., Сороковикова О. С. Надсеточное моделирование однородной изотропной турбулентности в одномерном и двумерном случаях // Фундаментальные проблемы моделирования турбулентных и двухфазных течений. Том 2. Численное моделирование. – М: Наука. 2010. С. 60–137.
- 109 Глотов В. Ю., Головизнин В. М. Схема «кабаре» для двумерной несжимаемой жидкости в переменных «функция тока – завихренность» // Матем. моделирование. 2011. Т. 23, № 9. (в печати).
- 110 Tölke J., Krafczyk M. TeraFLOP computing on a desktop PC with GPUs for 3D CFD // International Journal of Computational Fluid Dynamics. 2008. Vol. 22, N 7. P. 443–456.
- 111 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.
- 112 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.
- 113 Куперштох А. Л. Реализация метода решеточных уравнений Больцмана на многопроцессорных графических ускорителях для 3D моделирования двухфазных систем типа жидкость–пар // Современная наука. 2011. Т. 5, № 2. С. 112–118.
- 114 Куперштох А. Л. Параллельные вычисления на многопроцессорных видеокартах для моделирования механики жидкости с фазовыми переходами методом решеточных уравнений Больцмана // Материалы IX Международной научной конференции "Импульсные процессы в механике сплошных сред", Николаев, Институт импульсных процессов и технологий НАН Украины, 15-19 августа, 2011. С. 42-46.

- 115 NVIDIA CUDA C. Programming Guide. Version 4.0. 2011.
- 116 Harvey M. J., De Fabritiis G., Giupponi G. Accuracy of the lattice-Boltzmann method using the Cell processor // *Physical Review E*. 2010. Vol. 78, N 5. P. 056702.
- 117 Bernaschi M., Rossi L., Benzi R., Sbragaglia M., Succi S. Graphics processing unit implementation of lattice Boltzmann models for flowing soft systems // *Physical Review E*. 2009. Vol. 80, N 6. P. 066707.
- 118 Боярченко А. С., Поташников С. И. Использование графических процессоров и технологии CUDA для задач молекулярной динамики // *Вычислительные методы и программирование*. 2009. Т. 10, № 1. С. 9–23.
- 119 Kaufman A., Fan Z., Petkov K. Implementing the lattice Boltzmann model on commodity graphics hardware // *Journal of Statistical Mechanics*. 2009, N 6. P. P06016.
- 120 Tölke J. Implementation of a lattice Boltzmann kernel using the Compute Unified Device Architecture developed by nVIDIA // *Comput. Visual Sci.* 2010. Vol. 13, N 1. P. 29–39.
- 121 Nickolis J., Dally W. J. The GPU computing era // *IEEE Micro*. 2010. Vol. 30, N 2. P. 59–69.
- 122 Kuznik F., Obrecht C., Rusaouen G., Roux J.-J. LBM based flow simulation using GPU computing processor // *Computers and Mathematics with Applications*. 2010. Vol. 59, N 7. P. 2380–2392.
- 123 Жуковский М. Е., Усков Р. В. О применении графических процессоров видеоускорителей в прикладных задачах (Часть I. Обзор технологии). Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. Москва, 2010.
- 124 Давыдов А. А., Лацис А. О., Луцкий А. Е., Смольянов Ю. П., Четверушкин Б. Н., Шильников Е. В. Многопроцессорная вычислительная система гибридной архитектуры МВС–Экспресс // *Докл. АН*. 2010. Т. 434, № 4. С. 459–463.
- 125 Клосс Ю. Ю., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В. Решение уравнения Больцмана на графических процессорах // *Вычислительные методы и программирование*. 2010. Т. 11, № 1. С. 148–156.
- 126 Obrecht C., Kuznik F., Tourancheau B., Roux J.-J. A new approach to the lattice Boltzmann method for graphics processing units // *Computers and Mathematics with Applications*. 2011. Vol. 61, N 12. P. 3628–3638.

127 Schönherr M., Kucher K., Geier M., Stiebler M., Freudiger S., Krafczyk M. Multi-thread implementation of the lattice Boltzmann method on non-uniform grids for CPUs and GPUs // Computers and Mathematics with Applications. 2011. Vol. 61, N 12. P. 3730–3743.