

Численное решение кинетических уравнений для высокоскоростных течений разреженного газа*

В.А. Титарев^{1,2}

ФИЦ ИУ РАН¹, МФТИ²

Анализ обтекания спускаемых аппаратов произвольной (реалистичной) формы требуют создания методов компьютерного моделирования пространственных течений разреженного газа. В настоящей работе рассматривается задача построения эффективного параллельного численного метода и пакета программ для решения кинетического уравнения с модельным интегралом столкновений Е.М. Шахова на современных многоядерных ЦПУ в приложении к аэродинамике спускаемых аппаратов. В качестве модельной задачи рассматривается расчет обтекания Воздушно-космического аппарата ЦАГИ.

1. Введение

Создание летательных космических аппаратов, движущихся в верхних слоях атмосферы, тесно связано с задачами расчета их динамического и теплового взаимодействия с воздушной средой. Одним из способов решения этих задач является численное решение кинетического уравнения Больцмана для функции распределения молекул по скоростям с точным либо модельным интегралом столкновений. В настоящей работе будет представлено обобщение разрабатываемого автором численного метода решения кинетического уравнения [1–3] на случай высокоскоростных течений разреженного газа на неструктурированной и двухуровневой модели MPI+OpenMP. В качестве примера применения метода представлены расчеты обтекания модели Воздушно-Космического Аппарата (ВКА) ЦАГИ.

2. Расчетные уравнения

Состояние разреженного газа в точке $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ определяется функцией распределения молекул по скоростям $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$, где $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ — компоненты вектора молекулярной скорости по направлениям (x_1, x_2, x_3) соответственно. Макроскопические переменные, такие как числовая плотность n , температура T , давление p , средняя скорость газа $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ и поток тепла $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$, выражаются через функцию распределения в виде интегралов по пространству молекулярных скоростей. Для проведения расчетов удобнее использовать безразмерные переменные. Пусть n_* , T_* , l_* — некоторые характерные значения числовой плотности, температуры и линейного размера. Введем характерные значения давления и скорости $p_* = mn_*R_gT_*$, $v_* = \sqrt{2R_gT_*}$. Перейдем к безразмерным переменным по формулам

$$\mathbf{x}' = \frac{\mathbf{x}}{l_*}, \quad n' = \frac{n}{n_*}, \quad p' = \frac{p}{p_*}, \quad T' = \frac{T}{T_*}, \quad \mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u}}{v_*}, \quad \boldsymbol{\xi}' = \frac{\boldsymbol{\xi}}{v_*}, \quad \mathbf{q}' = \frac{\mathbf{q}}{mn_*v_*^3}, \quad f' = \frac{f}{n_*v_*^3}.$$

Степень разреженности газа характеризуется параметром разреженности δ , который обратно пропорционален числу Кнудсена Kn , определенному по длине свободного пробега λ_* :

$$\delta = \frac{l_*p_*}{\mu_*v_*} = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{\text{Kn}}, \quad \text{Kn} = \frac{\lambda_*}{l_*}.$$

Далее будем обозначать безразмерные величины теми же буквами, что и размерные, поскольку это не приводит к неоднозначности. Кинетическое уравнение Больцмана для

*Работа поддержана проектами РФФИ 15-01-07911, 15-07-02986 и грантом Правительства РФ по постановлению N 220 по договору N 11.G34.31.0072, заключенного между Министерством образования и науки РФ, ведущим ученым и МФТИ.

функции распределения f молекул по скоростям с S - модельным интегралом столкновений [4] имеет вид

$$\begin{aligned}\xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} &= J, \quad J = \nu(f^+ - f), \quad \nu = \frac{\delta p}{\mu}, \\ f^+ &= f_M \left(1 + \frac{8}{5}(1 - \text{Pr}) S_\alpha c_\alpha \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) \right), \quad S = \frac{\mathbf{q}}{nT^{3/2}}, \quad f_M = \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp(-c^2), \\ \left(n, n\mathbf{u}, \frac{3}{2}nT + nu^2, \mathbf{q} \right) &= \int \left(1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \frac{1}{2}\mathbf{v}v^2 \right) f d\boldsymbol{\xi}, \quad \mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{T}}, \quad \mathbf{v} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}.\end{aligned}\tag{1}$$

Здесь предполагается суммирование по повторяющимся греческим индексам в пределах от 1 до 3. На поверхности тела используется граничное условие диффузного отражения молекул с полной тепловой аккомодацией. В дальнейшем принималось $\mu \sim \sqrt{T}$, что соответствует межмолекулярному взаимодействию по закону жестких сфер.

3. Численный метод

Стационарное решение кинетического уравнения (1) находим методом установления по времени как предел при $t \rightarrow \infty$. В пространстве молекулярных скоростей несобственные интегралы от функции распределения заменим собственными интегралами по некоторой ограниченной области, в которой введем неструктурированную конечно-объемную сетку с центрами ячеек $\boldsymbol{\xi}_j = (\xi_{1j}, \xi_{2j}, \xi_{3j})$. Общее количество узлов сетки обозначим через N_ξ . Пусть $\boldsymbol{\Xi}_k$ — вектор, компонентами которого являются k -компонента молекулярной скорости во всех узлах сетки $\boldsymbol{\Xi}_k = (\xi_{k1}, \xi_{k2}, \xi_{k3}, \dots, \xi_{kN_\xi})^T$. Функции \mathbf{f} , $\mathbf{f}^{(S)}$ будем задавать в центрах ячеек скоростной сетки, интерпретируя их как векторы длины N_ξ с компонентами $f_j = f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_j)$, $f_j^{(S)} = f^{(S)}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_j)$. Кинетическое уравнение (1) в нестационарной форме переписывается в виде системы из N_ξ уравнений:

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\boldsymbol{\Xi}_\alpha \circ \mathbf{f}) = \mathbf{J}, \quad \mathbf{J} = \nu(\mathbf{f}^{(S)} - \mathbf{f}).\tag{2}$$

Здесь через \circ обозначена операция покомпонентного умножения двух векторов: $c = a \circ b$ — вектор с компонентами $c_i = a_i b_i$. Расчетная область в физических переменных разбивается на контрольные объемы (ячейки) V_i тетраэдральной, пирамидальной, гексаэдральной или призматической формы. Интегрируя уравнение (2) интегрируется по четырехмерному контрольному объему области $V_i \times [t^n, t^{n+1}]$, получаем неявную одношаговую схему вида

$$\begin{aligned}\frac{\Delta \mathbf{f}_i}{\Delta t} &= \mathbf{R}_i^{n+1}, \quad \mathbf{R}_i^{n+1} = -\frac{1}{|V_i|} \sum_{l=1} \boldsymbol{\Phi}_{li}^{n+1} + \mathbf{J}_i^{n+1}, \quad \Delta \mathbf{f}_i = \mathbf{f}_i^{n+1} - \mathbf{f}_i^n, \\ \boldsymbol{\Phi}_{li}^{n+1} &= \int_{A_{il}} (\boldsymbol{\xi}_{nil} \circ \mathbf{f}) ds, \quad \boldsymbol{\xi}_{nil} = n_{1l} \boldsymbol{\Xi}_1 + n_{2l} \boldsymbol{\Xi}_2 + n_{3l} \boldsymbol{\Xi}_3.\end{aligned}\tag{3}$$

Численный поток $\boldsymbol{\Phi}_{li}^{n+1}$ вычисляется по обычной формуле решения задачи о распаде разрыва, использующей значения функции распределения, экстраполированные на грани ячейки находятся с помощью процедуры реконструкции. Для ячеек произвольной формы используется кусочно-линейное представление функции распределения в пространственной ячейке, обеспечивающее второй порядок аппроксимации по пространству. Коэффициенты данного представления вычисляются методом наименьших квадратов с использованием значений \mathbf{f} в ячейках шаблона реконструкции, который формируется путем рекурсивного добавления к ячейке V_i необходимого числа ее непосредственных соседей. Для гексаэдральных ячеек предусмотрена возможность переключения на вычисление значений на гранях

ячеек путем одномерной интерполяции в направлении нормали к грани. Для подавления паразитных осцилляций на разрывах для обоих типов реконструкции обычным образом вводится ограничитель наклонов.

Для построения консервативной аппроксимации S-модельного интеграла столкновений используется метод [5], в котором уравнения для макроскопических величин включают в себя не только законы сохранения, но и векторное уравнение для релаксации вектора потока тепла:

$$\mathbf{H}(\mathbf{W}) = \sum_{j=1}^{N_\xi} \begin{pmatrix} 1 \\ \xi_j \\ \xi_j^2 \\ v_j v_j^2 \end{pmatrix} (f_j^{(S)} - f_j) \omega_j + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ 2 \text{Pr } \mathbf{q} \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{W} = \begin{pmatrix} n \\ \mathbf{u} \\ T \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Для каждой ячейки i система из восьми уравнений (4) решается методом Ньютона

$$M(\mathbf{W}^{s-1})(\mathbf{W}^s - \mathbf{W}^{s-1}) = -\mathbf{H}(\mathbf{W}^{s-1}), \quad s = 1, 2, \dots, \quad M = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{W}}. \quad (5)$$

Проводя приближенную линеаризацию (3) по времени и группируя члены, получаем

$$\left((1 + \Delta t \nu_i^n) \mathbf{I}_\xi + \frac{\Delta t}{|V_i|} \sum_{l=1} \frac{\partial \Phi_{il}^n}{\partial \mathbf{f}_i^n} \right) \circ \Delta \mathbf{f}_i + \frac{\Delta t}{|V_i|} \sum_{l=1} \left(\frac{\partial \Phi_{il}^n}{\partial \mathbf{f}_i^n} \right) \circ \Delta \mathbf{f}_{i_l} = \Delta t \mathbf{R}_i^n. \quad (6)$$

Здесь $\mathbf{I}_\xi = \text{diag}(1, \dots, 1)^T$ — единичная матрица размерности N_ξ . При решении системы (6) полагаем, что в левой части численный поток аппроксимируется противоточной схемой первого порядка. Далее производится приближенная факторизация разреженной матрицы системы на основе подхода, предложенного в [6], так что система легко решается в два прохода. В качестве критерия сходимости к стационарному решению используется условие малости невязки в дискретных законах сохранения массы, импульса и энергии газа в интегральной норме:

$$\sum_i |e_i^n| \cdot |V_i| \leq 10^{-5}, \quad e_i^n = \sum_j \left(1, \xi, \xi^2 \right)_j^T \mathbf{R}_{ij}^n \omega_\alpha. \quad (7)$$

Прямое применение описанной разностной схемы для высокоскоростных течений затруднено в связи с быстрым ростом числа ячеек скоростной сетки как функции числа Маха набегающего потока. Для типичного расчета $N_\xi \approx (5M_\infty)^3$. В имеющейся литературе предлагается использовать адаптивную сетку типа восьмеричного дерева [7, 8]. В настоящей работе для расчетов под нулевым углом атаки предлагается использовать более простой метод, подходящий для инженерных расчетов. В пространстве скоростей около точек $\xi = U_\infty$ (набегающий поток) и $\xi = 0$ (поверхность тела) вводятся кубические области с шагом сетки $\Delta \xi = 0.5$. В остальной области используются тетраэдры, размер которых плавно растет до $\approx 0.5\sqrt{T_0}$, где T_0 — температура торможения.

4. Программный комплекс “Несветай-3Д”

Описанный численный метод решения кинетического уравнения реализован в пакете программ “Несветай-3Д” [1, 9], структура которого представлена на фиг. 1. Пакет состоит из вычислительного ядра (базовой библиотеки), непосредственно кинетического решателя и препроцессоров пространственной и скоростной сеток. Исходный код пакета написан на языке Fortran 2008 с элементами объектно-ориентированного программирования. Ядро пакета представляет собой набор модулей, реализующих базовые операции, необходимые для



Рис. 1. Структура пакета программ “Несветай-3Д”.

проведения расчетов. Препроцессор пакета используется для разбиения пространственных сеток на блоки для проведения параллельных вычислений на многоблочных сетках. Кинетический решатель является надстройкой над ядром и реализует неявную разностную схему (3) решения кинетического уравнения. Препроцессор скоростной сетки обрабатывает входные файлы с учетом плоскостей симметрии и вывод в файл окончательные узлы и веса квадратурной формулы.

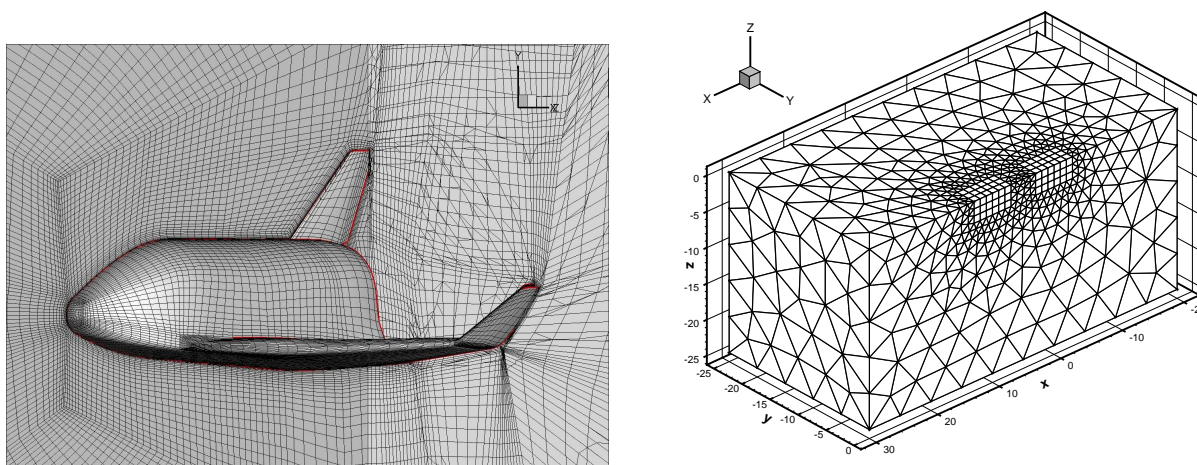


Рис. 2. Расчетные сетки в физическом (слева) и скоростном (справа, показана четверть области) пространствах.

Для ускорения вычислений метод решения реализован на многопроцессорных ЭВМ с разбиением расчетной сетки на блоки в фазовом пространстве двумя способами. При использовании параллельного алгоритма с разбиением сетки в скоростном пространстве каждый MPI процесс строит решение уравнения на одном шаге по времени для своего набора скоростных точек для всей пространственной сетке и находит вклады в интегральные суммы для вычисления макроскопических величин (5) и невязки (7), которые складываются с помощью MPI_AllReduce. Второй подход к построению параллельных алгоритмов использует декомпозицию сетки в физическом пространстве; при этом складывание частичных интегральных сум не требуется. Сравнение данных подходов к организации параллельных вычислений с помощью неявной одношаговой схемы второго порядка аппроксимации по

пространству (6) с использованием MPI проводилось в [2, 3]. Показана хорошая масштабируемость кода на 4-х ядерных процессорах Intel Xeon до 512 вычислительных ядер.

В настоящей работе используется разбиение скоростной сетки как более удобное для стационарных расчетов. В [2, 3] показано, что такая организация вычислений может приводить к потере масштабируемости на большом числе ядер из-за использования коллективных операций в (5), (7). Также существуют существенные ограничения на размер пространственной сетки, поскольку вся структура связности хранится на каждом ядре. Чтобы обойти упомянутые проблемы при организации параллельных вычислений на современных процессорах с большим числом физических ядер, в программном комплексе используется многоуровневое распараллеливание, которое активно развивается в последние годы в приложении к газодинамическим расчетам [10, 11]. В двухуровневой модели число MPI процессов N_{mpi} равняется числу используемых узлов, либо процессоров; число OpenMP нитей на 1 MPI процесс $N_{\text{omp}} = N_{\text{core}}/N_{\text{mpi}}$. Предварительные расчеты показывают, что на современных многоядерных процессорах Intel Xeon (12-18 физических ядер) гибридная версия считает примерно в 1.5 раза быстрее версии кода с использованием только MPI.

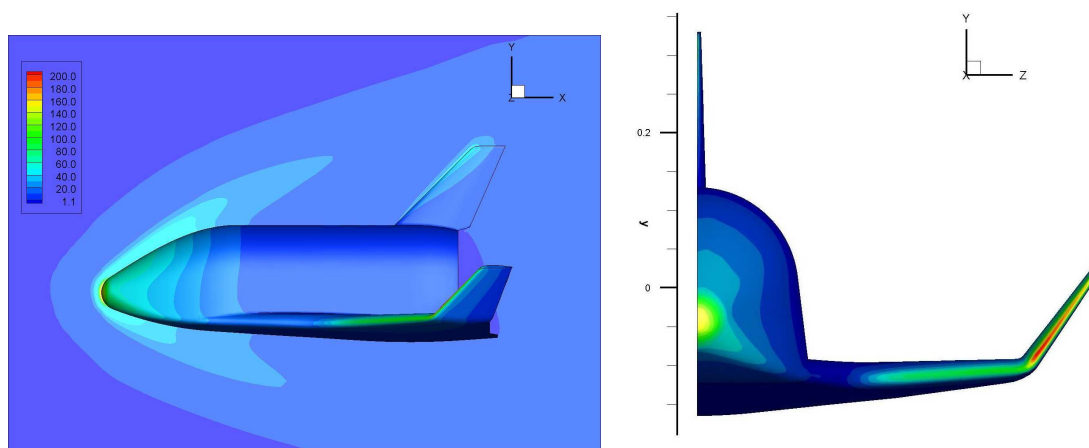


Рис. 3. Распределение давления в плоскости симметрии и на поверхности тела (слева) и потока тепла по поверхности (справа).

5. Тестовая задача

В качестве иллюстрации применения пакета программ к задачам внешней аэродинамики построим гиперзвуковое поле течения вокруг Воздушно-Космического Аппарата (ВКА) ЦАГИ. Модель ВКА имеет сложную форму и состоит из фюзеляжа с затупленным носком, двух крыльев, вертикального киля и щитка. Общая длина тела со щитком - 10 метров. Общая длина ВКА и значения давления и температуры в набегающем потоке выбираются в качестве масштабов длины l_* , p_* , T_* . Температура поверхности принималась равной температуре набегающего потока (холодное тело).

Для расчетов использовались суперкомпьютеры НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова и Лаборатории математического моделирования нелинейных процессов в газовых средах МФТИ. В работе [3] построено обтекание ВКА для числа Маха набегающего потока $M_\infty = 2.2$. Двухуровневый MPI+OpenMP метод и адаптивная скоростная сетка позволили построить решение для безразмерной скорости набегающего потока $U_\infty = 10$, что соответствует числу Маха $M_\infty = 10.95$. Параметр разреженности принимался равным $\delta = 100$. Расчетная гексаэдральная сетка в физическом пространстве использовала симметрию ВКА и состояла из 305 тысяч ячеек. Скоростная сетка состояла из 26 тысяч ячеек. Таким образом, общее число расчетных ячеек в шестимерном пространстве равнялось 7.8 миллиардам, см фиг. 2.

Численный алгоритм сошелся к стационарному решению за 24 часа при использова-

нии схемы второго порядка аппроксимации и 144 ядер. Фиг. 3 иллюстрирует распределение давления и потока тепла в плоскости симметрии и на поверхности модели. Видна типичная картина сверхзвукового течения вокруг затупленного холодного тела. Вблизи носка тела начинает формироваться отошедшая ударная волна. Поскольку локальный параметр разреженности, посчитанный по радиусу закругления носка достаточно мал, фронт волны сильно размыт. Для выбранного режима обтекания за телом образуется зона возвратного течения (не показана).

6. Выводы

Представлены первые результаты моделирование сверхзвукового обтекания спускаемого аппарата на основе численного решения кинетического уравнения с использованием двухуровневого распараллеливания MPI+OpenMP. Показана принципиальная возможность проведения таких расчетов программным комплексом “Несветай-3Д”. В настоящее время ведется работа по реализации метода на ускорителях Intel Xeon Phi.

Литература

1. В.А. Титарев. Неявный численный метод расчета пространственных течений разреженного газа на неструктурированных сетках. *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 50(10):1811–1826, 2010.
2. М. Думбсер, В.А. Титарев, С.В. Утюжников. Неявный многоблочный метод решения кинетического уравнения на неструктурированных сетках. *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 53(5):762–782, 2013.
3. V.A. Titarev, M. Dumbser, S.V. Utyuzhnikov. Construction and comparison of parallel implicit kinetic solvers in three spatial dimensions. *J. Comput. Phys.*, 256:17–33, 2014.
4. Е.М. Шахов. Об обобщении релаксационного кинетического уравнения Крукса. *Изв. АН СССР. МЖТ*, (5):142–145, 1968.
5. V.A. Titarev. Conservative numerical methods for model kinetic equations. *Computers & Fluids*, 36(9):1446 – 1459, 2007.
6. I.S. Men'shov and Y. Nakamura. An implicit advection upwind splitting scheme for hypersonic air flows in thermochemical nonequilibrium. In *A Collection of Technical Papers of 6th Int. Symp. on CFD*, volume 2, page 815. Lake Tahoe, Nevada, 1995.
7. R.R. Arslanbekov, V.I. Kolobov, A.A. Frolova. Kinetic solvers with adaptive mesh in phase space. *Physical Review E*, 88:063301, 2013.
8. C. Baranger, J. Claudel, N. Herouard, and L. Mieussens. Locally refined discrete velocity grids for stationary rarefied flow simulations. *J. Comput. Phys.*, 257:572–593, 2014.
9. В.А. Титарев. Программный комплекс Несветай-3Д моделирования пространственных течений одноатомного разреженного газа. *Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Элект. журнал*, (6):124–154, 2014.
10. И. В. Абалакин, П.А. Бахвалов, А.В. Горобец, А.П. Дубень, Т.К. Козубская. Параллельный программный комплекс NOISE-TTE для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики. *Выч. мет. программирование*, 13(3):110–125, 2012.

11. А.В. Горобец. Параллельная технология численного моделирования задач газовой динамики алгоритмами повышенной точности. *Журнал выч. математики и матем. физ.*, 4(55):641–652, 2015.

Numerical solution of kinetic equations for high-speed rarefied gas flows

Vladimir Titarev

Keywords: kinetic equations, unstructured mesh, parallel computing

Analysis of aerodynamics of re-entry vehicles of realistic shape requires the development of computational methods for rarefied gas flow modeling. The present work is devoted to the problem of creating efficient parallel method and parallel software to solve the kinetic equation with the model collision integral of E.M. Shakhov on modern multi-core CPU as applied to such problems. As a test calculation, the high speed rarefied gas flow over the reentry space vehicle model of TsAGI is considered.