# Оглавление

[Оглавление 2](#_Toc375560875)

[1. Введение 3](#_Toc375560876)

[2. Выбор методов моделирования 4](#_Toc375560877)

[2.1 Метод конечных разностей 5](#_Toc375560878)

[2.2 Метод решеточных уравнений Больцмана 10](#_Toc375560879)

[3. Построение приложения 15](#_Toc375560880)

[3.1 Метод решеточных уравнений Больцмана 17](#_Toc375560881)

[3.2 Метод конечных разностей 18](#_Toc375560882)

[4. Сравнение ресурсоемкости методов 19](#_Toc375560883)

[5. Выводы 21](#_Toc375560884)

[Литература 22](#_Toc375560885)

# Введение

Задачи из области гидродинамики встречаются в нашей жизни повсеместно, начиная от расчета давления воды в водопроводе, и заканчивая моделированием обтекания корпуса автомобиля. Обтекание судна или поведение самолета в воздухе, магистральные нефтепроводы или региональные ГЭС – для таких объектов пренебрежение гидродинамическими характеристиками может стать фатальным.

Как известно, поведение жидкости или газа полностью описывается уравнениями Навье-Стокса. Однако также известно, что решение этих уравнения возможно только для очень узкого класса задач (к примеру, течение Пуазейля), или с введением существенных ограничений на свойство рассматриваемой жидкости (к примеру, несжимаемость или отсутствие вязкости, etc). Задачи определения поведения объектов и потоков жидкости при взаимодействии их друг с другом появились задолго до компьютерной техники.

До становления инженерных методов расчета использовалось испытание моделей, скажем, самолета в аэродинамической трубе. Однако ввиду необходимости выдерживать неизменность чисел подобия при испытании модели, этот экспериментальный подход сталкивается с трудно преодолимыми препятствиями (вплоть до необходимости создавать модель, близкую к натуральной величине).

Инженерные подходы, обзорное понимание которых можно получить из, являются шагом вперед по сравнению с натурными испытаниями. Однако для большей части задач можно выделить следующие негативные стороны такого подхода: во-первых, это приближенные результаты. И если для стотысячетонного судна погрешность в пару процентов при расчете лобового сопротивления может быть приемлемой, то для скоростной яхты ценой этого может стать победа в гонке. Во-вторых, нельзя не отметить, что для расчета задач этими методами необходимо знать хотя-бы часть значений, которые можно получить только на эксперименте, измерив их, и которые не могут быть вычислены из задаваемых условий.

С учетом вышесказанного, неоспоримым является тот факт, что возможность смоделировать сколь угодно сложную, или большую, или и то и другое вместе систему при помощи компьютера – следующий шаг в развитии подходов к решению гидродинамических задач.

# Выбор методов моделирования

После первого успешного решения аэродинамической задачи баллистики в 1945 году (ЭНИАК), компьютеры применяются для все более и более разнообразных задач. Сразу становятся заметны преимущества компьютерного моделирования перед инженерным подходом и, более того, над натурными испытаниями. Даже на ЭНИАКе было возможно достичь точности большей, чем с использованием иных методов решения задачи, с гораздо меньшими трудозатратами.

Однако, даже бурное развитие компьютерной техники за последние пол столетия, введение параллельных вычислений и все такое прочее не позволяют решать все встающие перед исследователями или инженерами задачи. В основном это связано с огромным количеством степеней свободы рассматриваемых задач (турбулентность – до ). Бывает что для достижения сходимости решения на длительном временном интервале модельного времени требуется затратить часы, а то и дни реального времени!

И потому следующими шагами в развитии подходов к решению гидродинамических задач является усовершенствование непосредственно методов моделирования, то есть представление задачи в виде набора чисел, с которыми компьютер и будет оперировать.

Поскольку мощности компьютера не безграничны, то выбор подходящего метода, который даст ответ на задачу за приемлемое время, крайне важен.

И потому **цель работы** – сравнить скорость расчета и расход памяти для решения уравнений Навье-Стокса методом конечных разностей, и для метода решеточных уравнений Больцмана.

Остановимся более подробно на методах, для которых и производилось сравнение результативности.

## Метод конечных разностей

Как уже было сказано, несжимаемые жидкости – жидкости неизменной плотности, т.е. . Любая жидкость описывается уравнениями Навье-Стокса.

(2.1.1)

(2.1.2)

Первое уравнение прямо получается из второго закона Ньютона, а второе – условие неразрывности, получаемое из закона сохранения массы.

Если переписать уравнения для компонент скорости, получим следующее:

(2.1.3)

Уравнения сильно нелинейные, из-за второго слагаемого в первом уравнении, т.н. «конвекционного члена». Для применения к решению этой системы компьютера, их необходимо каким-либо образом свести к алгебраическим уравнениям, т.е. провести процедуру дискретизации.

Существует значительное количество методов дискретизации, ограничимся методом конечных разностей. Продемонстрируем его на одномерном д.у. второго порядка.



Рисунок 1. Одномерная регулярная сетка

Интервал , на котором необходимо решить д.у. разбивается на под-интервалов одинаковой длинны , таким образом получается сетка, состоящая из точек, .

Дифференциальное уравнение теперь рассматривается только в этих точках. Воспользовавшись определением производной

(2.1.4)

И не переходя к пределу, мы можем приблизить непрерывный дифференциальный оператор в точке дискретным разностным оператором

(2.1.5)

Не переходя к пределу. Также, может использоваться кроме вышеприведенной передней разности обратная

(2.1.6)

И центральная

(2.1.7)

Интуитивно понятно, что чем меньше сетка, тем лучше такие разности приближают дифференциальный оператор.

Производная второго порядка аппроксимируется

(2.1.8)

Тогда, например, для уравнения конвекции-диффузии

(2.1.9)

Будет получена система из уравнений

Поскольку определитель матрицы коэффициентов этого уравнения может принимать отрицательные значения при , если используется схема с центральной разностью, иногда используется так называемся схема с донорными ячейками, и производные представляются в виде

(2.1.10)

Для двумерного случая, рассматривается прямоугольная область

На которой вводится сетка. Сетка разделена на ячеек по оси , и на ячеек по оси . Таким образом, и , а задача решается только на пересечении линий сетки.

Для дискретизации уравнений Навье-Стокса нам понадобится оператор Лапласа:

(2.1.11)

А также, понятие смещенной сетки. Смещенной называется сетка для решения дифференциального уравнения, такая что разные переменные определены в разных точках на сетке.

Рисунок . Двумерная сдвинутая сетка

Идея рассмотрения, такого как представлено на рис. (2), отлично описана в [3]

Опуская последовательное введение разностных операторов, которое можно найти в [Hirt et al., 1975], запишем сразу дискретное уравнение для компоненты скорости :







Совершенно аналогичные выражения получаются для второй компоненты скорости.

Итак, для каждой компоненты скорости, мы имеем по или уравнений.

**Для замыкания системы уравнений, рассмотрим граничные условия**.

1. ”No slip”. Такое условие соответствует неподвижной на границах жидкости. Потому, очевидно, для значений скорости на границе, получаем



Поскольку вертикальные границы не содержат значений скорости, а горизонтальные , то накладывается соотношение

 (2.1.12)

1. “Free slip” – наоборот, соответствует проскальзыванию жидкости вдоль границы без трения, и не допускает прохождения жидкости через границу.



 (2.1.13)

Для дискретизации по времени, воспользуемся явной схемой, т.е. методом Эйлера, который использует разложения первого порядка

Итак, **алгоритм вычисления** будет следующим:

(2.1.14)

(2.1.15)

Вводя обозначение

Потребуем, чтобы дискретизация давления по времени была неявной:

(2.1.16)

(2.1.17)

Подставив дискретные уравнения для скоростей в уравнение непрерывности, получаем уравнение Пуассона для давления:

(2.1.18)

Итак, для компьютерного расчета алгоритм следующий:

1. Вычисляем исходя из
2. Решаем уравнение Пуассона для давления
3. Вычисляем новые значения скоростей
4. Повторяем.

## Метод решеточных уравнений Больцмана

Зарождение решеточных методов можно отнести к 1986 году, когда был представлен простой клеточный автомат, который удовлетворяет закону сохранения «вещества» на микроскопическом уровне, и потому способен отображать всю сложность движения реальной жидкости.

Сеточные методы в гидродинамике зародились в 1986г. когда был представлен клеточный автомат, поведение которого удовлетворяет закону сохранения массы. Перспективы были очень многообещающи – из-за полной локальности вычислений неограниченная параллелизуемость, прямое моделирование любых гидродинамических токов, фактически – более простой аналог модели Изинга для турбулентности.

Однако, были выявлены некоторые недостатки, решением которых исследователи[5,6,7] и занимались последние десятилетия. Наиболее универсальным результатом стало внедрение решеточного Больцмановского метода.

Для начала, остановимся на теории Больцмана для молекулярной динамики. Очевидно, что систему из классических частиц можно описать 3N уравнениями Ньютона

(2.2.1)

(2.2.2)

Где – координата частицы, , – сила, которая действует на одну частицу как результат взаимодействия или внешнего поля.

Поскольку в реальных системах количество молекул по порядку близко к , решение системы из по меньшей мере уравнений, с силой которая в общем случае зависит от поведения многих частиц задача совершенно нетривиальная. Параллельно с ограничением характера взаимодействия резонным представляется рассмотрение такой системы со статистической точки зрения.

Поставив вопрос как «Вероятность обнаружения частицы в точке со скоростью в момент времени , можно представить функцию распределения как плотность искомой вероятности. В 1872 г. Больцман представил свое знаменитое уравнение

(2.2.3)

Где левая часть уравнения соответствует движению частиц под воздействием поля силы , а в правой части стоит оператор столкновений, соответствующий парному взаимодействию (столкновению) двух частиц

Дальнейшее упрощение уравнения () возможно, если принять частицы точечными, бесструктурными и взаимодействующими короткодействующим потенциалом. Тогда, при отсутствии внешних полей, частицы проводят большую часть времени на свободных траекториях, и потому оператор столкновений распадается на gain and loss компоненты

(2.2.4)

Соответствующие столкновениям, в результате которых молекулы попадают или выходят из элемента объема

При допущении, что не существует корреляции между сталкивающимися молекулами, взаимодействие факторизуется на

(2.2.5)

И далее возможно получить уравнение Больцмана в следующем виде:

(2.2.6)

Следует отметить, что невыполнение допущения о молекулярном хаосе может происходить и в жидкостях с незначительной вязкостью. Ярким примером являются длительные следы, впервые рассмотренные Альдером и Вайнрайтом [8], в которых наблюдалось аномально высокая стойкость корреляции движения молекул, поддерживаемая самосогласованными вихрями, созданными движениями молекул.

Основной идеей в получении гидродинамических соотношений из уравнения Больцмана есть понятие локального равновесия. Математически оно вводится как локальная функция распределения , такая что оператор столкновений равен нулю:

(2.2.7)

Это приводит нас к так называемому состоянию детального равновесия:

(2.2.8)

(2.2.9)

Отсюда следует, что – аддитивная инвариантная величина относительно столкновений, т.е. не изменяется при столкновениях. Очевидно потребовать, чтобы было функцией динамических инвариантов относительно столкновений , это дает

(2.2.10)

Где – пять Лагранжевых множителей, накладывающие функциональную зависимость на – плотность, импульс и энергию.

Могут быть вычислены наложением условия сохранения следующих величин:

(2.2.11)

Где – плотность, – макроскопическая скорость, и – энергия на единицу объема.

Интересно отметить, что при наложении таких требований равновесная функция распределения полностью соответствует распределению Максвелла-Больцмана.

Изложим идею получения уравнений Навье-Стокса в рамках процедуры Чапмана-Энскога, которая заключается в разложении вышеприведенных уравнений движения по параметру малости, которым выступает число Кнудсена.

(2.2.12)

Этот метод также является частным случаем т.н. мульти-масштабных методов, которые заключаются в представлении пространственно-временных переменных в терминах иерархии (медленные/быстрые) масштабов, так чтобы каждая переменная была на соответствующем ей масштабе.

Тогда, в нашем случае

(2.2.13)

А дифференциальные операторы раскладываются

(2.2.14)

Оператор потока

(2.2.15)

И аналогично, представление оператора коллизий

(2.2.16)

Как показал Фиш и другие [6], в порядке малости .

С использованием также законов сохранения, можно получить, во втором порядке по

(2.2.17)

Откуда просто следуют уравнения Навье-Стокса

(2.2.18)

Где

Прежде чем перейти к непосредственно дискретному представлению уравнения Больцмана, укажем еще одно допущение, касающееся оператора коллизий, предложенное Батнагаром-Гроссом-Кроком[10], которое заключается в следующем.

Вместо математически сложного нелинейного интегрального оператора, вводится BGK оператор

(2.2.19)

Где ассоциируется со временем релаксации к локальному равновесию и в общем случае является сложным функционалом на функции распределения .

Таким образом, обосновав в общих чертах применимость теории Больцмана к решению задач гидродинамики, перейдем к описанию дискретной схемы LBE моделирования. Не будем останавливаться на историческом аспекте и связи между LBE и LGCA [6], а перечислим основные моменты, необходимые для моделирования.

Во-первых, непрерывные интегралы () переходят в дискретные суммы по всем направлениям.

(2.2.20)

Во-вторых, используется модель BGK, которая как уже указывалось, соответствует сокращению времен релаксации до одного. Тогда, уравнение

(2.2.21)

Является дискретным аналогом модели BGK, и соответственно называется LBGK уравнением.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  |  | *Энергия* | *Весовой коэфф.* |
|  | *1/3* | *0*  *½* | *4/6*  *1/6* |
|  | *1* | *0*  *½*  *2* | *6/12*  *2/12*  *1/12* |
|  | *1/3* | *0*  *½*  *1* | *16/36*  *4/36*  *1/36* |
|  | *1/3* | *0*  *½*  *1* | *12/36*  *2/36*  *1/36* |

Исходя из локального энергетического баланса, можно получить для равновесного распределения, в третьих

Где .

Приведем здесь некоторые параметры для сеток типа :

# Построение приложения

Исходные коды могут быть найдены в репозитории по адресу *https://github.com/Mr-Destiny/ModelApp-Cpp.*

Для сравнения эффективности был выбран следующий набор ресурсов приложения – время, необходимое для симулирования одинаковой длительности процесса, при условии эквивалентных параметров модели – чисел Рейнольдса, характерных размеров и граничных условий, и потребляемая приложением память.

Также было решено не учитывать время, затрачиваемое на отрисовку, и потому таймер запускался и останавливался при входе и выходе в вычислительный цикл.

И было сделано еще одно допущение – поскольку, очевидно, скорость алгоритма во многом зависит от качества программиста, то полезным результатом является относительная, а не абсолютная разница в потреблении ресурсов, а качество программиста при реализации одного и второго алгоритма считается неизменным.

**Для упрощения задания внутренних препятствий, в приложение добавлен простейший механизм считывания бинарных изображений (рис 3), таким образом, что черный цвет соответствует препятствию, и к этой ячейке применяются “no slip” граничные условия.

Рисунок . Бинарная маска препятствий

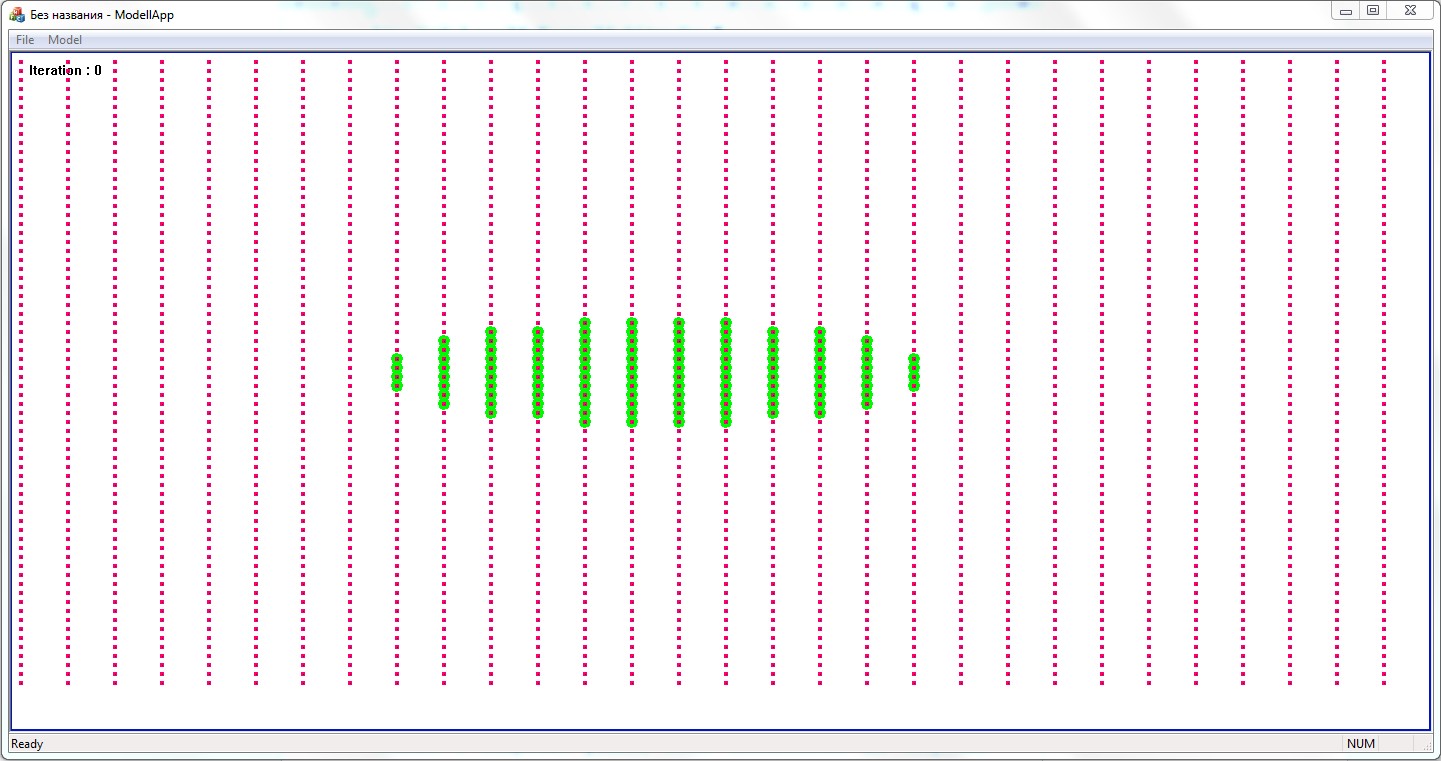


Рисунок . Главное окно приложения

Интерфейс приложения представлен на (рис 4). С его помощью можно запустить расчет (с помощью соответствующих пунктов меню «»), или выйти из приложения. Минимализм связан с тем, что данное приложение, как будет показано в следующем разделе, может использоваться для симуляции правдоподобных физических явлений, в первую очередь создавалось для проверки «базового» набора функций методов моделирования гидродинамики.

Далее остановимся более подробно на алгоритме работы приложения.

## Метод решеточных уравнений Больцмана

Рисунок . Диаграма классов LBE

Диаграмма классов, отвечающих за моделирование дискретного уравнения Больцмана, представлена на (рис5).

Алгоритм работы представлен на схеме:



Рисунок . Алгоритм 1

Отдельно хотим прокомментировать пункт «Отразить функцию распределения», который выполняется, если ячейка определена как граница. Это – простейший способ реализовать “no slip” граничные условия.

## Метод конечных разностей

С алгоритмической точки зрения, этот метод выглядит проще, однако нельзя забывать о нелинейности систем уравнений.



Рисунок . Алгоритм 2

Для решения применяется метод Ньютона-Рафсона[], ввиду совпадания количества уравнений и количества неизвестных.

# Сравнение ресурсоемкости методов

Время в микросекундах, затраченное на симуляцию 20 секунд реального времени для потоков с числом Рейнольдса порядка представлено в таблице:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Задача 1 | Задача 2 | Задача 3 | Задача 4 |
| LBE | 7500 | 8350 | 7960 | 9800 |
| Finite element | 29840 | 25740 | 15270 | 11200 |

И пиковое потребление памяти в килобайтах:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Задача 1 | Задача 2 | Задача 3 | Задача 4 |
| LBE | 3400 | 3348 | 3410 | 4010 |
| Finite element | 2980 | 5480 | 4021 | 4250 |

Битовые карты задач показаны на рис().

Испытания проводились на прямоугольной сетке , размером ячеек. Один шаг по времени соответствует 0.2 секундам. []

Симуляция методом производилась на сетке, а шаг по времени, для обеспечения сходимости, выбирался следующим образом:[]

**



Рисунок . Задача 3



Рисунок . Задача 2



Рисунок . Задача 4



Рисунок . Задача 1

Обсудим полученные результаты. Видно, что методы демонстрируют наибольшую разницу в производительности на задаче 2. Это связано с тем, что алгоритм LBE не вычисляется для кластеров внутренних препятствий, а алгоритм FD учитывает их как набор ограничивающих условий, что не приводит к уменьшению числа уравнений.

# Выводы

Проведенная работа позволяет ответить на поставленный в задаче вопрос – метод LBE на рассмотренных задачах показал себя более эффективным, чем метод решения уравнений Навье-Стокса методом конечных разностей.

Также нельзя не отметить, что эффективность метода LBE возрастает при увеличении количества внутренних неоднородностей, что активно используется для моделирования потоков в пористых телах.

Потребление памяти обоими методами можно принять эквивалентным, и в рамках современных цен на оперативную память – несущественным. Если же учесть, что половина всей используемой приложением памяти, как оказалось, тратится на отрисовку изображения, то приходим к выводу, что главным предметом дальнейших оптимизаций должно стать оптимизация потребления ресурсов ЦП.

Одним из способов этого достичь является использование векторных инструкций к процессору… но это будет уже совсем другая работа.

# Литература

1. Chirila, Dragos B. “Introduction to Lattice Boltzmann Methods” (2010). http://www.awi.de/fileadmin/user\_upload/Research/Research\_Divisions/Climate\_Sciences/Paleoclimate\_Dynamics/Modelling/Lessons/Einf\_Ozeanographie/lecture\_19\_Jan\_2010.pdf.
2. Engler, Simon T. “Benchmarking the 2D Lattice Boltzmann BGK Model.” *Short Communication. Amsterdam Center for Computacional Science, Amsterdam, The Netherlands* (2003). http://www.pa.msu.edu/~duxbury/courses/phy480/BGK\_handin.PDF.
3. Griebel, Michael, Thomas Dornseifer, and Tilman Neunhoeffer. *Numerical Simulation in Fluid Dynamics: A Practical Introduction*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998.
4. Maier, Robert S., Robert S. Bernard, and Daryl W. Grunau. “Boundary Conditions for the Lattice Boltzmann Method.” *Physics of Fluids* 8, no. 7 (1996): 1788. doi:10.1063/1.868961.
5. Mohamad, A.A., and A. Kuzmin. “A Critical Evaluation of Force Term in Lattice Boltzmann Method, Natural Convection Problem.” *International Journal of Heat and Mass Transfer* 53, no. 5–6 (February 2010): 990–996.
6. Succi, Sauro. *The Lattice Boltzmann Equation: For Fluid Dynamics and beyond*. Oxford [u.a.]: Clarendon Press, 2009.
7. Sukop, Michael C, and Daniel T Thorne. *Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers*. Berlin [u.a.: Springer, 2007.
8. Zou, Qisu, and Xiaoyi He. “On Pressure and Velocity Boundary Conditions for the Lattice Boltzmann BGK Model.” *Physics of Fluids* 9 (1997): 1591.
9. Ванаг, В.К. «Исследование пространственно-распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата», *Успехи физических наук* 169, no. 5 (май 1999): 481-498
10. P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook (1954). "A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems". [*Physical Review*](http://en.wikipedia.org/wiki/Physical_Review) **94** (3): 511–525. [Bibcode](http://en.wikipedia.org/wiki/Bibcode):[1954PhRv...94..511B](http://adsabs.harvard.edu/abs/1954PhRv...94..511B). [doi](http://en.wikipedia.org/wiki/Digital_object_identifier):[10.1103/PhysRev.94.511](http://dx.doi.org/10.1103%2FPhysRev.94.511).