

ИНКАРБЕКОВ МЕДЕТ КАРКЫНБЕКОВИЧ

**ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЙ 3D СИМУЛЯТОР ДЛЯ
МОДЕЛИРОВАНИЯ ТУРБУЛЕНТНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ ТЕЧЕНИЙ
МЕТОДОМ КРУПНЫХ ВИХРЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ФИЛЬТРОВАННОЙ ФУНКЦИИ ПЛОТНОСТИ**

АННОТАЦИЯ

диссертации на соискание степени
доктора философии (PhD) по специальности
6D060300 – «Механика»

Актуальность темы исследования. Один из наиболее сложных вопросов в области исследования энергетики и окружающей среды связан с точным предсказанием турбулентных реагирующих потоков. Даже во времена Осборна Рейнольдса (более века тому назад) существовала необходимость в разработке точных методов предсказания поведения химически инертных и реагирующих турбулентных потоков.

Один из возможных способов классификации методов расчета турбулентных течений базируется на соотношении “точно” разрешаемой и моделируемой частей энергетического спектра турбулентности. На базе этих соображений существует три основных подхода численного моделирования турбулентных течений: (I) Прямое численное моделирование (DNS), (II) осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса (RANS), (III) моделирование крупных вихрей (LES).

Прямое численное моделирование (DNS) это численное решение полных уравнений Навье-Стокса с физически согласованной точностью по пространству и времени таким образом, чтобы разрешить все части энергетического спектра турбулентности (т.е. описать вихрей всех масштабов). Шаг интегрирования по времени и размеры ячеек для пространственного интегрирования должны быть достаточно малыми для разрешения всех величин колмогоровского масштаба. Такие требования сильно ограничивают спектр задач. На сегодняшний день, DNS расчеты проводятся с числом Рейнольдса порядка 10^5 . Для примера, число Рейнольдса течения воздуха, обтекающего автомобиля со скоростью 100 км/час составляет около 10^6 , а число Рейнольдса атмосферных течения, определяющие погоду, варьируются в пределах $10^9 - 10^{11}$. Таким образом, DNS позволяет моделировать потоки только при малом числе Рейнольдса.

RANS предназначен для статистического описания потока. Усреднение по времени используется чтобы уменьшить диапазон масштабов, присутствующих в турбулентных потоках. Время усреднения намного превышает самый большой временной масштаб турбулентных флуктуаций, и в результате

получается уравнение сохранения, которое описывает эволюцию только средних величин потока. Величины потока, такие как скорость и давление, подразделяются на среднюю и флуктуационную составляющие на основе разложения Рейнольдса. Влияние снятых флуктуаций турбулентности на среднее течение включено в тензор напряжений Рейнольдса.

Недостатком RANS является то, что все полученные RANS модели турбулентности не являются совершенными. При расчете определенных течений необходимо не только выбрать наиболее подходящую модель турбулентности, но и оценить степень достоверности результатов, полученных с ее помощью. Основные модели турбулентности основаны на закономерности простых "канонических" течений такие как: закон стенки, формула Колмогорова, и.т.д. Как только эти закономерности перестают выполняться, точность расчета падает. Константы в моделях турбулентности «настроены» на определенный набор потоков; каждая модель имеет свою «область применимости». Также полученные результаты недостаточно охватывают физику течения.

Третий подход, известный как моделирование крупных вихрей (LES), в которой вместо того, чтобы моделировать все турбулентные величины потока, как это делается в RANS, крупные вихри решаются напрямую, а мельчайшие вихри подсеточного масштаба моделируются. Такое моделирование дает возможность решать прикладные задачи с высокой точностью, и в то же время требование к разрешению сетки гораздо меньше по сравнению с прямым численным моделированием (DNS). LES является более точным, чем подход RANS, так как большие вихри содержат большую часть турбулентной энергии и отвечают за большую часть передачи импульса и турбулентного перемешивания, и LES захватывает эти вихри во всех деталях непосредственно, в то время как они моделируются в подходе RANS. Кроме того, малые масштабы имеют тенденцию быть более изотропными и однородными, чем крупные, и, таким образом, моделирование движений SGS должно быть проще, чем моделирование всех масштабов в рамках одной модели, как в подходе RANS.

Успешная реализация LES зависит от двух факторов: (1) насколько точно смоделированы величины подсеточного масштаба (SGS), (2) и насколько точно эти модели решены с помощью численных методов.

Методология фильтрованная функция плотности (FDF), оказалась наиболее эффективной для замыкания системы уравнений LES. Главное преимущество FDF в том, что после его применения источник химических реакции в уравнении переноса скалярных переменных получается в замкнутом виде. Еще одно немаловажное преимущество в том, что замыкания величин подсеточного масштаба (например, подсеточный тензор напряжений, подсеточный поток массы, и.т.д.) с помощью FDF эквивалентны SGS моделям второго порядка, в то время как большинство нынешних SGS моделей

(например, замыкание Смагоринского) имеют нулевой порядок, включая динамических версий.

В методе LES очень желательным фактором является то, что при увеличении разрешения сетки и/или повышении порядка точности применяемой схемы, влияние величин подсеточного масштаба уменьшалось (стремление к решению DNS). Также желательно, чтобы точность прогнозирования метода LES не зависела от размеров ячеек сетки. Разрывный метод Галеркина (DG) в комбинации с методом Монте Карло способен удовлетворить всем этим критериям.

Такое сочетание математического и численного моделирования обеспечивает надежное прогнозирование турбулентных течений. Тем не менее, такой подход является требовательным к вычислительному ресурсу, особенно для прикладных задач, включающие химическую кинетику. Причиной этому служит огромное количество частиц в метод Монте-Карло, которое имеет порядок от миллионов до миллиардов частиц. Для каждой частицы численно решается система стохастических дифференциальных уравнений. Даже при таком раскладе, требование метода LES к разрешению вычислительной сетки на несколько порядков меньше по сравнению с DNS.

Время симуляции прикладных задач с помощью предлагаемого LES/FDF модели с помощью последовательного кода достигает порядка от месяцев до нескольких лет. Поэтому требуется применение параллельных технологии. Параллельный код может быть адаптирован на вычислительных системах, основанных на CPU (центральное процессорное устройство) и/или на GPU (графическое устройство). Известно, что GPU имеет ряд преимуществ по сравнению с CPU. Главное из них является стоимость. Если собрать вычислительную систему, основанную на GPU, то ее стоимость будет на несколько порядков меньше стоимости эквивалентной по производительности вычислительной системы, основанной на CPU.

В нашей работе мы предлагаем разработать новый высокоэффективный симулятор для моделирования сложных турбулентных течений методом крупных вихрей. Для достижения высокой эффективности, вышеперечисленные математическая модель FDF, гибридная схема DG-МС и технология параллельных вычислений на основе графических процессоров будут включены в этот программный комплекс. Результаты работы расширить возможности FDF, что даст возможность решать более комплексные и прикладные задачи в области исследования реагирующих турбулентных течений.

Цель данной диссертационной работы заключается в создании численной методологии для моделирования крупных вихрей реагирующих турбулентных течений на основе модели фильтрованной функций плотности с использованием метода разрывного Галеркина и технологии параллельных вычислений на графических процессорах. Такой подход дает возможность

надежно и эффективно решать широкий спектр турбулентных задач, включая химически реагирующие режимы.

Для достижения цели сформулированы следующие **задачи исследования**:

- Разработать основную решатель осредненных по методу моделирования крупных вихрей уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости на основе разрывного метода Галеркина.

- Разработать методику численного решения смоделированного уравнения переноса фильтрованной функции вероятности с помощью метода Монте Карло и интегрировать с основным решателем.

- Разработка и реализация параллельного алгоритма разрывного метода Галеркина с помощью технологии CUDA.

- Разработка и реализация параллельного алгоритма метода Монте Карло с помощью технологии CUDA.

- Анализ вычислительной и общей производительности разработанной численной методологии путем моделирования двумерного и трехмерного развивающегося по времени слоя смешения как в условиях отсутствия химической реакции, так и в условиях химической реакции.

Объектом исследования является турбулентное реагирующее течение несжимаемой жидкости.

Предметом исследования является моделирование крупных вихрей развивающегося по времени слоя смешения на основе модели фильтрованной функции плотности и разрывного метода Галеркина с использованием графических процессоров.

Методы исследования: современные методы математического и численного моделирования динамики и химической кинетики медленных турбулентных течений.

Научная новизна заключается в том, что гибридная схема DG-МС для численного решения LES/FDF модели впервые разработана и реализована с помощью технологии CUDA для проведения расчетов на вычислительных системах, основанных на графических устройствах. Это существенно расширяет круг доступных для численного решения задач для исследователей.

Научные положения, выносимые на защиту:

- Методика численного решения осредненных по методу моделирования крупных вихрей уравнений Навье-Стокса на основе разрывного метода Галеркина с использованием подсеточной модели фильтрованной функции плотности;

- Разработка параллельного алгоритма разрывного метода Галеркина для решения основных уравнений потока с использованием технологии CUDA;

- Разработка параллельного алгоритма метода Монте Карло для решения уравнения переноса фильтрованной функции плотности с использованием технологии CUDA;

- Анализ производительности разработанной численной методологии на основе моделирования двумерного и трехмерного развивающегося по времени слоя смешения

Достоверность и обоснованность научных положений, выводов и результатов диссертационной работы определяется использованием фундаментальных законов сохранения при построении математических моделей; удовлетворительным согласованием смоделированных численных результатов с данными прямого численного моделирования.

Теоретическая и практическая значимость исследования. Разработанная в диссертации новая численная методология фильтрованной функции плотности для моделирования крупных вихрей реагирующих турбулентных течений на основе метода разного Галеркина с использованием технологии CUDA для параллельных вычислений может быть применена для дальнейшего численного исследования двумерных и трехмерных турбулентных реагирующих течений теоретического и прикладного характера.

Связь диссертационной работы с другими научно-исследовательскими работами. Данная работа выполнена в рамках проекта программы грантового финансирования фундаментальных исследований в области естественных наук МОН РК «Высокопроизводительный 3D симулятор фильтрованной функции плотности для моделирования крупных вихрей турбулентных реагирующих течений, основанный на методах разрывного Галеркина и Монте Карло» (2018-2020 гг., № ГР 0118РК00564)

Апробация работы. Основные положения и результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих научных мероприятиях:

- APS March Meeting 2017, Session V35: General Fluid Mechanics (March 13–17, 2017, New Orleans, Louisiana, USA);

- 70th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Session M30: High Performance Computing (November 19–21, 2017; Denver, Colorado, USA);

- Актуальные проблемы информатики, механики и робототехники. Цифровые технологии в машиностроении (4-5 октября, 2018, Алматы);

- Seventeenth International Conference on Numerical Combustion (May 6-8, 2019 Aachen, Germany);

- International scientific conference «Inverse Problems In Finance, Economics and Life Sciences» (August 31– September 4, 2019, Almaty);

- научных семинарах лаборатории Laboratory for Computational Transport Phenomena Департамента инженерной механики Питтсбургского Университета (2017, 2018, г. Питтсбург, Пенсильвания, США);

- научных семинарах механико-математического факультета КазНУ им. аль-Фараби (2014-2019, Алматы);

- научных семинарах кафедры прикладной механики и инженерной графики КазНУ им. К.И. Сатпаева (2019, Алматы);

Публикации. По теме диссертации опубликовано 9 печатных работ, из них: 1 статья в зарубежном научном журнале, входящим в базу данных Scopus

и Web of Science с импакт фактором 1.071; 3 статей в журналах, рекомендованных ККСОН МОН РК; 3 тезисов, опубликованных в материалах зарубежных конференций; 2 тезисов в материалах международных конференций, проведенных в РК. Опубликованные по теме диссертации работы приводятся в списке литературы.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех разделов, заключения, списка использованных источников из 74 работ. Работа изложена на 80 страницах, содержит 38 иллюстрации, 6 таблицы.

Во введении отражены следующие моменты: актуальность, основные цели работы, новизна, научно-практическое значение диссертационной работы, степень ее разработанности.

Первый раздел посвящен математической модели течения и содержит в себе два подразделов. В первом подразделе выводятся основные фильтрованные уравнения течения на основе метода моделирования крупных вихрей и описывается способ замыкания этих уравнений с помощью метода Смагоринского. Во втором подразделе описываются способ замыкания химических источников с использованием смоделированного уравнения переноса фильтрованной функции плотности.

Второй раздел посвящен численной модели течения и содержит в себе четыре подразделов. В первом подразделе дается общая формулировка разрывного метода Галеркина для уравнения сохранения в слабой форме с использованием базисных функции Лежандра. Во втором и третьем подразделах представлены временная дискретизация основных уравнения с помощью метода Хорина и пространственная дискретизация основных уравнений течения с помощью разрывного метода Галеркина, соответственно. В четвертом подразделе отражен численный алгоритм решения уравнения переноса фильтрованной функции плотности с помощью лагранжевого метода Монте Карло.

Третий раздел посвящен параллельной реализации численной методологии с помощью графических процессоров и содержит в себе два подразделов. В первом подразделе разработан параллельный алгоритм разрывного метода Галеркина с использованием технологии CUDA. Здесь детально описывается оптимальное использование каждого типа памяти и определяется наиболее соответствующий размер блока потоков. Во втором подразделе разработан параллельный алгоритм метода Монте Карло с использованием технологии CUDA. Здесь отражается детальная реализация каждой из пяти стадии, включающее выбора алгоритма генерации случайных чисел, распределение потоков в блоке и оптимальное использование памяти устройства.

В четвертом разделе представлены параметры течения. В качестве тестовой задачи выбран развивающегося по времени слой смешения как без учета химической реакции, так и с учетом химической реакции. Задача

смоделирована в двумерном и трехмерном пространствах. Даны физические параметры, которые включают число Рейнольдса и число Дамкелера; и параметры численных расчетов, включающие разрешение сетки и порядок аппроксимирующего полинома.

Пятый раздел отражает результаты расчетов и содержит в себе два подразделов. В первом подразделе приводятся результаты относительно вычислительной производительности разработанной численной методологии. Для двумерного случая производительность оценивается путем сравнений результатов расчетов полученные с помощью параллельного алгоритма на графическом устройстве с результатами расчетов полученные путем последовательных вычислений на центральном процессоре. Производительность решателя при трехмерных вычислениях оценивается путем определения количества операций с плавающей запятой в секунду. Во втором подразделе приводятся результаты относительно прогностических возможностей, согласованности и сходимости разработанной гибридной схемы LES-FDF-DG. Согласованность и сходимость схемы оценивается путем сравнений решений первых и вторых моментов скаляров полученные с помощью FDF и DG расчетов. Полученные результаты проанализированы статистически путем вычислений осредненных по Рейнольдсу вторых моментов, разрешенных дисперсий и полных дисперсий. Приводятся результаты с учетом химической реакции для разных чисел Дамкелера.

В заключении приводятся основные результаты и выводы, полученные в диссертационной работе.