

ІҢКӘРБЕКОВ МЕДЕТ ҚАРҚЫНБЕКҰЛЫ

ФИЛЬТРЛЕНГЕН ТЫҒЫЗДЫҚ ФУНКЦИЯСЫН ҚОЛДАНА ОТЫРЫП, ҮЛКЕН ҚҰЙЫНДАР ӘДІСІМЕН ТУРБУЛЕНТТІ ӘСЕРЛЕСУШІ АҒЫНДАРДЫ МОДЕЛЬДЕУГЕ АРНАЛҒАН ЖОҒАРЫ ӨНІМДІ 3D СИМУЛЯТОР

6D060300 – «Механика» мамандығы бойынша философия докторы (PhD)
дәрежесін алу үшін диссертациясына

АҢДАТПА

Зерттеу тақырыбының өзектілігі. Энергетикалық және экологиялық зерттеулер саласындағы ең күрделі мәселелердің бірі турбулентті реакциялық ағындарды дәл болжаумен байланысты. Осборн Рейнольдстың кезінде де (бір ғасырдан астам уақыт бұрын) химиялық инертті және реактивті турбулентті ағындардың әрекетін болжаудың дәл әдістерін жасау қажеттілігі туындаған.

Турбулентті ағындарды есептеу әдістерін классификациялаудың мүмкін жолдарының бірі турбулентті энергетикалық спектрдің «дәл» шешілген және имитацияланған бөліктерінің қатынасына негізделген. Осы ойларға сүйене отырып, турбулентті ағындарды сандық модельдеуінің үш негізгі тәсілі бар: (I) Тура сандық модельдеу (DNS), (II) Рейнольдс бойынша орташаланған Навье-Стокс теңдеулері (RANS), (III) үлкен құйындарды модельдеу (LES).

Тікелей сандық модельдеу (DNS) - бұл толқынды энергетикалық спектрдің барлық бөліктерін шешетіндей кеңістік және уақыт бойынша физикалық дәйекті дәлдікпен толық Навье-Стокс теңдеулерінің сандық шешімі болып табылады (яғни барлық масштабтағы құйындыларды сипаттаңыз). Уақыт бойынша интегралдау қадамы және кеңістіктік бойынша интегралдауға арналған ұяшықтардың мөлшері Колмогоров шкаласының барлық мәндерін шешуге жеткілікті аз болуы керек. Мұндай талаптар шешуге болатын есептердің ауқымын едәуір шектейді. Бүгінгі күні DNS есептеулері Рейнольдстың шамамен 10^5 санымен шектеледі. Мысалы, 100 км/сағ жылдамдықпен кетіп бара жатқан автомобильдің айналасындағы ауа ағынының Рейнольдс саны 10^6 -ға жуық, ал ауа райын анықтайтын атмосфералық ағындардың Рейнольдс саны 10^9 -дан 10^{11} -ге дейін өзгереді. Осылайша, DNS ағындарды тек кішігірім Рейнольдс санымен есептеуге мүмкіндік береді.

RANS ағындарды статистикалық сипаттауға арналған. Уақыт бойынша орташалау турбулентті ағындарда болатын шкалалар ауқымын азайту үшін қолданылады. Орташалау уақыты турбулентті тербелістердің ең үлкен уақыт шкаласынан әлдеқайда үлкен және нәтиже тек орташаланған ағын мәндерінің эволюциясын сипаттайтын тасымал теңдеуі болады. Жылдамдық пен қысым сияқты ағын шамалары Рейнольдстың кеңеюіне негізделген орташа және

корреляция корреляция компоненттеріне жіктеледі. Орташа ағынға өлшенген турбуленттік ауытқудың әсері Рейнольдс кернеу тензорымен ескеріледі.

RANS әдісінің кемшілігі - RANS-пен алынған барлық турбуленттік модельдер толық жетілдірілмеген. Белгілі бір ағындарды есептеу кезінде турбуленттіліктің ең қолайлы моделін таңдап қана қоймай, оның көмегімен алынған нәтижелердің сенімділік дәрежесін бағалау қажет. Турбуленттіліктің негізгі модельдері қарапайым «канондық» ағындардың заңдарына негізделген, мысалы: қабырға заңы, Колмогоров формуласы және т.б. Осы заңдылықтар орындалуын тоқтата бастағаннан кейін есептеу дәлдігі төмендейді. Турбуленттік модельдердегі тұрақтылар белгілі бір ағындар жиынтығына «келтірілген»; әрбір модельдің өзіндік «аясы» болады. Сондай-ақ, алынған нәтижелер ағынның физикасын жеткілікті түрде қамтымайды.

Үлкен құйындарды модельдеу (LES) деп аталатын үшінші тәсіл, мұнда RANS әдісіндегідей ағынның барлық турбулентті шамаларын модельдеудің орнына үлкен құйындар тікелей шешіліп, торақты масштабтағы ең кіші құйындар модельденеді. Мұндай модельдеу қолданбалы есептерді жоғары дәлдікпен шешуге мүмкіндік береді, сонымен бірге торды шешуге қойылатын талап тікелей сандық модельдеуге (DNS) қарағанда әлдеқайда төмен. LES RANS тәсіліне қарағанда дәлірек, өйткені үлкен құйындылар турбулентті энергияның көп бөлігін қамтиды және импульстің берілуі мен турбулентті араласудың көп бөлігі үшін жауап береді, ал LES бұл құйындыларды RANS тәсілінде модельденген кезде тікелей толық егжей-тегжейлі түсіреді. Сонымен қатар, кішігірім шкалалар үлкендерге қарағанда изотропты және біртектес болып келеді, сондықтан SGS қозғалыстарын модельдеу барлық масштабтарды RANS тәсіліндегідей бір модель ішіндегі модельдеуге қарағанда оңайырақ болуы керек.

LES әдісінің сәтті жүзеге асыу екі факторға байланысты: (1) торақты масштабтағы (SGS) мәндер қаншалықты дәл модельденеді, (2) және осы модельдер сандық әдістердің көмегімен қаншалықты дәл шешіледі.

Фильтрленген тығыздық функциясы әдістемесі (FDF) LES теңдеулер жүйесін тұйықтау үшін ең тиімді жодың бірі болып табылады. FDF-тің басты артықшылығы - оны қолданғаннан кейін скалярлық айнымалылардың тасымал теңдеуіндегі химиялық реакциялардың мүшесі тұйықталған түрде алынады. Тағы бір маңызды артықшылығы - торақты масштабтағы шамалардың FDF арқылы тұйықталуы (мысалы, торақты тензор, торақты масса ағыны және т.б.) екінші ретті SGS модельдеріне тең, ал қазіргі SGS модельдері (мысалы, Смагоринскийдің моделі) динамикалық нұсқаларын қоса алғанда нөлдік дәрежеге ие.

LES әдісінде тордың тығыздығы жоғарылаған сайын және / немесе қолданылған схеманың дәлдік реті артқан сайын, тор асты масштабтың мәндердің әсері азаяды (DNS шешіміне ұмтылу). Сонымен қатар LES әдісін болжау дәлдігі тор ұяшықтарының өлшемдеріне тәуелді болмағаны жөн.

Монте-Карло әдісімен біріктірілген Галеркин (DG) әдісі осы критерийлердің барлығын қанағаттандыруға қабілетті.

Математикалық және сандық модельдеудің бұл үйлесімі турбулентті ағындардың сенімді болжамын қамтамасыз етеді. Алайда, бұл тәсіл есептеуді қажет етеді, әсіресе химиялық кинетикаға қатысты қосымшалар үшін. Мұның себебі - Монте-Карло әдісіндегі саны бірнеше миллионан бірнеше миллиардқа жететін бөлшектердің көптігі. Әрбір бөлшек үшін стохастикалық дифференциалдық теңдеулер жүйесі сандық түрде шешіледі. Бұған қарамастан, есептеуіш торды шешуге арналған LES әдісінің талабы DNS талабынан бірнеше есе кіші.

Ұсынылған LES / FDF моделін қолдана отырып қолданбалы мәселелерді модельдеу уақыты тізбектелген кодты қолдана отырып шешу уақыты бірнеше айдан бірнеше жылға дейін жетуі мүмкін. Сондықтан параллель технологияны қолдану өте жөн. Параллель кодты CPU (орталық процессор) және GPU (графикалық құрылғы) негізіндегі есептеу жүйелерінде бейімдеуге болады. GPU процессормен салыстырғанда бірқатар артықшылықтарға ие екендігі белгілі. Ең бастысы - шығын. Егер сіз GPU-ға негізделген есептеу жүйесін жинасаңыз, онда оның құны процессорға негізделген өнімділікті есептеу жүйесіндегі эквиваленттің құнынан бірнеше рет төмен болады.

Біз өз жұмысымызда күрделі турбулентті ағындарды үлкен құйындылар әдісімен модельдеуге арналған жаңа тиімділігі жоғары симулятор жасауды ұсынамыз. Жоғары тиімділікке қол жеткізу үшін жоғарыда келтірілген FDF математикалық моделі, гибриді DG-МС алгоритмі және GPU негізіндегі параллельді есептеу технологиясы осы бағдарламалық кешенге енеді. Жұмыс нәтижелері FDF мүмкіндіктерін кеңейтеді, және реактивті турбулентті ағындарды зерттеу саласындағы күрделі және қолданбалы мәселелерді шешуге мүмкіндік береді.

Бұл диссертациялық жұмыстың мақсаты - үзіліссіз Галеркин әдісін және GPU-да параллельді есептеу технологиясын қолдана отырып, фильтрленген тығыздық функциясының моделі негізінде реактивті турбулентті ағындарды модельдеудің сандық әдістемесін құру. Бұл тәсіл көптеген турбулентті химиялық реакциясы бар ағындарды сенімді және тиімді шешуге мүмкіндік береді.

Мақсатқа жету үшін келесі зерттеу мәселелері тұжырымдалады:

- үзілісті Галеркин әдісі негізінде сығылмайтын сұйық үшін үлкен құйындарды модельдеу әдісі бойынша орташаланған Навье-Стокс теңдеулеріне арналған негізгі есептеуішті тұрғызу.

- Монте-Карло әдісін қолдана отырып, модельденген фильтрленген тығыздық функциясының тасымал теңдеуін сандық шешуінің әдістемесін жасау және негізгі сұйық қозғалысын есептеуішімен интегралдау.

- CUDA технологиясын қолдана отырып, үзіліссіз Галеркин әдісінің параллель алгоритмін құру және енгізу.

- CUDA технологиясын қолданып Монте-Карло әдісінің параллель алгоритмін құру және енгізу.

- Жасалған сандық әдіснаманың химиялық реакция болмаған кезде де, химиялық реакция жағдайында да уақыт бойынша дамитын екі өлшемді және үш өлшемді араласу қабатын модельдеу арқылы есептеу және жалпы көрсеткіштерін зерттеу.

Зерттеу нысаны - сығылмайтын сұйықтықтың турбулентті әсерлесуші ағыны.

Зерттеудің пәні - графикалық процессорларды қолдана отырып, фильтрленген тығыздық функциясы моделі және үзілісті Галеркин әдісі негізінде уақыт бойынша дамитын араласу қабатын үлкен құйындар әдісінің көмегімен модельдеу.

Зерттеу әдістері: баяу турбулентті ағындардың динамикасы мен химиялық кинетикасын математикалық және сандық моделдеуінің заманауи әдістері.

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 турбулентности для исследователей.

Жұмыстың ғылыми жаңалығы – LES / FDF моделінің сандық шешіміне арналған DG-МС гибридік схемасы алғаш рет CUDA технологиясының көмегімен жасалып, алғашқы рет енгізілгендігінде. Бұл зерттеушілер үшін сандық шешімге қол жетімді турбуленттілік есептерінің ауқымын едәуір кеңейтеді.

Қорғауға ұсынылатын ғылыми қағидалар:

- Фильтрленген тығыздық функциясының торақты моделін қолдана отырып сығылмайтын сұйық үшін үлкен құйындарды модельдеу әдісі бойынша орташаланған Навье-Стокс теңдеулерін үзілісті Галеркин әдісі негізінде сандық шешу методикасы;

- Үзілісті Галеркин әдісінің параллель алгоритмі, негізгі ағын теңдеулерін CUDA технологиясын қолдану арқылы шешу;

- Монте-Карлоның параллельді алгоритмі, CUDA технологиясының көмегімен сүзілген тығыздық функциясының тасымалдау теңдеуін шешу;

- Тұрғызылған сандық әдіснаманың уақыт бойынша дамитын екі өлшемді және үш өлшемді араласу қабатын модельдеу есебі негізінде алынған нәтижелердің қорытындысы.

Диссертациялық жұмыстың ғылыми қағидаларының, қорытындылары мен нәтижелерінің сенімділігі және дәлелдігі. Диссертациялық жұмыста қолданылған негізгі математикалық модельдер физиканың негізгі сақталу заңдарын қолдана отырып тұрғызылды;

имитацияланған сандық нәтижелердің тікелей сандық модельдеу нәтижелерімен қанағаттанарлық келісімі.

Зерттеудің теориялық және практикалық маңыздылығы.

Диссертациялық жұмыста үзілісті Галеркин әдісін және параллельді есептеу үшін CUDA технологиясын қолданып фильтрленген тығыздық функциясының негізінде үлкен құйындарды моделдеуге арналған жаңа сандық әдістемесі теориялық және қолданбалы сипаттағы екі-өлшемді және үш-өлшемді турбулентті әсерлесуші ағындарды одан әрі сандық зерттеу үшін қолданысқа ие бола алады.

Диссертациялық жұмыстың басқа зерттеу жұмыстарымен байланысы. Бұл жұмыс Білім және ғылым министрлігінің жаратылыстану ғылымдары саласындағы іргелі зерттеулерді гранттық қаржыландыру бағдарламасы жобасы аясында жүзеге асырылды: «Турбулентті әсерлесуші ағыстардың үлкен құйындарын модельдеуге арналған үзілісті Галеркин және Монте Карло әдістеріне негізделген жоғары-өнімді фильтрленген тығыздық функциясының 3D симуляторы» (2018-2020 жж., № ГР 0118РК00564)

Жұмыстың апробациясы. Диссертациялық жұмыстың негізгі ережелері мен нәтижелері келесі ғылыми іс-шараларда баяндалды және талқыланды:

- 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 қазан, 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);

- Laboratory for Computational Transport Phenomena зертханасының ғылыми семинарларында, Питтсбург университетінің машина жасау кафедрасы (2017, 2018, Питтсбург, Пенсильвания, АҚШ);

- әл-Фараби атындағы ҚазҰУ-нің механика-математика факультетінің ғылыми семинарларында (2014-2019, Алматы);

- Қ.И. Сәтбаев атындағы ҚазҰТЗУ-нің қолданбалы механика және инженерлік графика кафедрасының ғылыми семинарларында (2019, Алматы);

Жарияланымдар. Диссертация тақырыбы бойынша 9 басылым жарық көрді, оның ішінде: импакт-факторы 1,071 болатын Scopus және Web of Science мәліметтер базасына енгізілген 1 шетелдік мақала; ҚР БҒМ Білім және ғылым саласындағы бақылау комитеті ұсынған ғылыми басылымдарда 3 мақала; Шетелдік конференциялардың материалдарында жарияланған 3 тезис; Қазақстан Республикасында өткен халықаралық конференциялардың материалдарындағы 2 тезис. Диссертация тақырыбы бойынша жарияланған жұмыстар библиографияда келтірілген.

Дипломдық жұмыстың құрылымы мен көлемі. Диссертациялық жұмыс кіріспеден, төрт бөлімнен, қорытындыдан, жұмыста пайдаланылған 74 дерек көздерінің тізімінен тұрады. Жұмыс 80 бетте ұсынылған, 38 иллюстрациядан, 6 кестеден тұрады.

Кіріспеде келесі тармақтар көрсетілген: диссертациялық жұмыстың өзектілігі, жұмыстың негізгі мақсаттары, жаңалығы, ғылыми және практикалық құндылығы, өңделу дәрежесі.

Бірінші бөлім ағынның математикалық моделіне арналған және екі кіші бөлімнен тұрады. Бірінші кіші бөлімде негізгі үлкен құйындарды модельдеу әдісі негізінде ағынның негізгі орталандырылған теңдеулері шығарылады және осы теңдеулерді Смагоринский әдісі арқылы тұйықтау жолы сипатталады. Екінші кіші бөлімде моделденген фильтрленген тығыздық функциясының тасымалдау теңдеуін қолданып химиялық көздерді тұйықтау әдісі сипатталған.

Екінші бөлім ағынның сандық моделіне арналған және төрт бөлімнен тұрады. Бірінші бөлімде Лежандрдың базистік функцияларын қолдана отырып, сақталу теңдеуі үшін әлсіз түрдегі үзілісті Галеркин әдісінің жалпы тұжырымдамасын келтірілген. Екінші және үшінші кіші бөлімдерде Чорин әдісі бойынша негізгі теңдеулердің уақыт бойынша дискреттелуі және үзілісті Галеркин әдісі бойынша негізгі ағын теңдеулерінің кеңістіктік бойынша дискризациясы көрсетілген. Төртінші кіші бөлім лагранждық Монте-Карло әдісі қолданып фильтрленген тығыздық функциясының тасымалдау теңдеуін шешудің сандық алгоритмін көрсетеді.

Үшінші бөлім графикалық процессорларды қолдана отырып сандық әдістемені параллельді түрде жүзеге асыруға арналған және екі кіші бөлімнен тұрады. Бірінші кіші бөлімде CUDA технологиясын қолдана отырып, үзілісті Галеркин әдісінің параллель алгоритмі жасалған. Онда әр жад түрінің оңтайлы қолданылуы егжей-тегжейлі сипатталады және сәйкес келетін ағын блогының өлшемі анықталады. Екінші кіші бөлімде CUDA технологиясының көмегімен Монте-Карлоның параллель алгоритмі жасалған. Ол бес кезеңнің әрқайсысының егжей-тегжейлі орындалуын, соның ішінде кездейсоқ сандардың генерациясының алгоритмін таңдауды, блоктағы ағындардың таралуын және құрылғының жадын оңтайлы пайдалануды көрсетеді.

Төртінші бөлімде ағын параметрлері ұсынылған. Сынақ есебі ретінде химиялық реакциясыз да, химиялық реакциясы бар да уақыт бойынша дамиды екі өлшемді және үш өлшемді араласу қабатын модельдеу таңдалды. Есеп 2D және 3D кеңістіктерінде модельденген. Ағынның физикалық параметрлері болып табылатын Рейнольдс саны мен Дамкелер саны берілген; және сандық параметрлер, оның ішінде тордың өлшемдері және Лежандр көпмүшесінің жуықтау реті.

Бесінші бөлім есептеулердің нәтижелерін көрсетеді және екі кіші бөлімнен тұрады. Бірінші кіші бөлімде әзірленген сандық әдістеменің есептеу тез есептеу мүмкіндігіне қатысты нәтижелер келтірілген. Екі өлшемді жағдай үшін есептеу қуаты графикалық құрылғыдағы параллель алгоритмнің

көмегімен алынған есептеу нәтижелерін орталық процессордағы тізбекті есептеулер нәтижесінде алынған есептеу нәтижелерімен салыстыру арқылы бағаланады. 3D есептеулеріндегі параллель алгоритмнің өнімділігі жылжымалы нүктелі сандарды қосу операцияларының бір секундтағы санын анықтау арқылы бағаланады. Екінші кіші бөлімде тұрғызылған LES-FDF-DG гибриді схемасының болжамдау мүмкіндіктері, консистенциясы мен жинақтылығына қатысты нәтижелер келтірілген. Схеманың дәйектілігі мен жинақтылығы FDF және DG есептеулерінің көмегімен алынған скалярлардың бірінші және екінші моменттерінің шешімдерін салыстыру арқылы бағаланады. Алынған нәтижелер Рейнольдстің бойынша орталандырылған торасты дисперсияларын, шешілген дисперсияларын және толық дисперсияларын есептеу арқылы статистикалық түрде талданады. Нәтижелер Дамкелер санының әр түрлі мәндері үшін химиялық реакцияны ескере алынады.

Қорытындыда диссертациялық жұмыста алынған негізгі нәтижелер мен тұжырымдар келтірілген.