

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Владимира Александровича Титарева “Численное моделирование пространственных течений разреженного газа с использованием супер ЭВМ”, представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18. – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертационное исследование Владимира Александровича Титарева посвящено разработке методологии моделирования многомерных течений разреженного газа и применения методологии для решения практических задач, связанных с разработкой космических аппаратов и их элементов.

Структура диссертации включает введение, пять глав, заключение и список литературы. Во введении обоснована актуальность темы диссертации, определены основные цели и направления исследований. На защиту выносятся пять положений.

В первой главе сформулирован общий подход к математическому моделированию практических задач механики разреженного газа. Методы решения кинетических уравнений и комплексы программ опираются на общую методологию развиваемую автором диссертации, состоящую из построения приближенных (модельных) кинетических уравнений, построения шестимерной сеточной модели, разработки неявного метода интегрирования, создания комплекса программ для параллельных вычислений, проведения верификационных и валидационных расчетов в широком диапазоне входных параметров. На основе этого проводятся расчеты практических задач и выдаются рекомендации специалистам. В первой главе приводится краткий обзор подходов к построению приближенных кинетических уравнений, аппроксимирующих кинетическое уравнение Больцмана с точным интегралом столкновений. Обосновывается выбор модельного уравнения Е.М. Шахова, использование которого позволяет получить с хорошей точностью основные нужные для практических задач величины - макроскопические параметры газа, силовые и тепловые нагрузки. Описывается переход к безразмерной форме кинетического уравнения и линеаризованные формы уравнения для решения задач с малыми отклонениями течения от покоя.

Вторая глава посвящена описанию разработанного оригинального варианта метода дискретных скоростей для решения кинетического уравнения в трехмерном случае. В начале главы обсуждаются основные трудности решения кинетического уравнения в пространственном случае и формулируются общие требования к численным методам. Основные положения метода иллюстрируются в приложении к уравнению Больцмана с приближенным модельным интегралом столкновений и его частным (упрощенным) вариантом - моделью БГК. Предлагаемый в данной работе метод решения основывается на квазимонотонной разностной схеме С.К.Годунова. Основной особенностью метода является использование как многоблочных структурированных, так и произвольных неструктурированных сеток независимо в физическом и скоростном пространствах. Схема консервативна по интегралу столкновений. Для повышения разрешающей способности разностной схемы предложены различные способы реконструкции решения с использованием зарекомендовавших себя лимитеров. В рамках созданного метода решения предложена неоднородная дискретизация оператора переноса в зависимости от качества сетки. Предложен полностью неявный экономичный алгоритм продвижения по времени. Данные особенности метода продемонстрированы на решении прикладных задач со сложной геометрией, большими числами Маха набегающего потока и сильными перепадами давления и плотности газа.

В третьей главе приводится описание созданных автором программных комплексов “Несветай-2Д”, “Несветай-3Д”. Пакет программ “Несветай-2Д” предназначен для решения двумерных задач. Основное внимание в диссертации уделяется трехмерному пакету “Несветай-3Д” и реализованной в нем двухуровневой модели параллельных вычислений OpenMP + MPI. Каждый уровень параллельной реализации в “Несветай-3Д” основан на декомпозиции расчетной сетки. На верхнем уровне используется технология MPI-обмена данными между узлами супер-ЭВМ; при этом при распределении вычислений между узлами супер-ЭВМ возможно использование различных вариантов декомпозиции 6-мерной расчетной сетки. В первом подходе используется декомпозиция расчетной сетки в скоростном пространстве. Второй подход является традиционным для вычислительной аэродинамики и основан на использовании декомпозиции сетки в физическом

пространстве. На нижнем уровне организации параллельных вычислений всегда используется разбиение сетки в физическом пространстве на блоки и использование технологии OpenMP. Декомпозиция проводится с использованием открытых библиотек на этапе инициализации счета. Отмечается, что большинство шагов метода решения используют простые циклы OpenMP с динамической балансировкой. Однако реализация параллельного многопоточного метода LU-SGS решения системы уравнений для приращения функции распределения потребовала специальных изменений метода решения для того, чтобы скорость сходимости к стационарному решению не ухудшалась. В диссертации отмечено, что параллельная версия комплекса протестирована на суперкомпьютерах Университета Крэнфилда (Великобритания), МСЦ РАН, НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова, СПбПУ Петра Великого и МФТИ.

В данной главе приводится также достаточно подробное описание программного комплекса “Несветай-3Д”, который состоит из вычислительного ядра (базовой библиотеки), непосредственно кинетического решателя и препроцессоров сетки. Вычислительное ядро представляет собой набор модулей, реализующих базовые операции, необходимые для проведения расчетов: процедуры чтения пространственных сеток в различных форматах, построение информации о связности сетки; алгоритмы реконструкции скалярных функций методом наименьших квадратов на произвольной сетке; процедуры вывода пространственных и поверхностных данных в формате Tecplot. Кинетический решатель является надстройкой над ядром и реализует разностную схему решения кинетического уравнения. Препроцессоры используются для разбиения расчетной сетки при параллельных вычислениях.

В четвертой главе работы представлены результаты численного моделирования стационарных задач течения разреженного газа через микроканалы. С помощью пакета “Несветай-2Д” построено численное решение задачи для трубы бесконечной длины, имеющей полностью произвольную форму поперечного сечения. Для трубы конечной длины с помощью основного пакета “Несветай-3Д” детально рассмотрено решение задачи истечения разреженного газа из камеры высокого давления в камеру низкого давления для произвольного значения перепада давления. Решение строилось для круглой трубы постоянного и переменного (конического либо составного)

сечения и через трубу прямоугольного сечения. Приведено сравнение результатов вычислений с аналитическим решением задачи Пуазейля для уравнений Навье-Стокса. Установлены границы применимости данных подходов для течения разреженного газа. Часть вычислений проводилась с целью верификации и валидации численного метода и приближенного интеграла столкновений. Так для стандартной тестовой задачи истечения газа в вакуум через короткую круглую трубу показано хорошее согласие результатов с расчетами по методу ПСМ, решением точного уравнения Больцмана и с экспериментальными данными; получен близкий ко второму порядку сходимости численного метода для основной расчетной величины – расхода массы. Для круглых труб умеренной длины показано хорошее согласие результатов с расчетами. Продемонстрирована эффективность параллельной реализации численного метода для систем с общей памятью и важность использования неявной схемы для быстрой сходимости процесса установления решения задачи.

Пятая глава посвящена решению задач внешнего гиперзвукового обтекания тел потоком разреженного газа. Для моделирования течений с большими числами Маха набегающего потока предложен простой метод построения неравномерной сетки в пространстве скоростей. На задаче гиперзвукового обтекания круглого цилиндра проведена оценка точности модельных уравнений и метода решения на неравномерной скоростной сетке. Задача решалась для аргона и азота, чисел Маха набегающего потока $M=10$ и 25 и режимов обтекания от разреженного газа до сплошной среды. Показана хорошая точность S-модельного кинетического уравнения в задачах гиперзвукового обтекания затупленных тел, включая задачу определения теплообмена на поверхности. Выполнены расчеты обтекания моделей спускаемых аппаратов реалистичной формы под разными углами атаки с большими числами Маха набегающего потока. Здесь проведены две серии расчетов. В первой серии рассматривалось обтекание модели воздушно-космического аппарата (ВКА) ЦАГИ. Проведено сравнение с расчетами комплекса SMILE и показано хорошее согласие результатов. Во второй серии рассматривалось обтекание ВКА и затупленного сегментально-конического тела с настройками для высоты полета 100 км, скорости набегающего потока до 7900 м/с и угла атаки 25 градусов. Таким образом, показана принципиальная возможность моделирования гиперзвуковых течений вокруг

спускаемых аппаратов с помощью численного решения кинетического уравнения за приемлемое время как на многоблочных структурированных сетках, так и на неструктурированных сетках типа тетра-призм.

Актуальность работы обосновывается необходимостью создания методологии численного моделирования пространственных течений разреженного газа, что связано с созданием новых образцов космической техники.

Новыми научными результатами диссертационной работы являются:

1. Предложена методология численного моделирования пространственных течений разреженного газа, которая включает в себя разработку численного метода, прикладного параллельного пакета программ и проведение серийных расчетов.
2. Разработан новый полностью неявный метод решения кинетического уравнения для областей сложной формы на произвольных сетках, как в физическом, так и в скоростном пространствах.
3. Созданы комплексы программ для параллельных вычислений “Несветай-2Д” и “Несветай-3Д”.
4. Проведена верификация и валидация созданных расчетных методов на сложных пространственных задачах, включая задачи гиперзвукового обтекания тела потоком разреженного газа.
5. Получено решение задачи о стационарном течении разреженного газа через канал произвольной длины и переменной формы поперечного сечения под действием произвольного перепада давления. Показано хорошее согласие расчетов с имеющимися в литературе результатами. Уточнены границы применимости существующих приближенных методик.
6. Продемонстрирована возможность получать за приемлемое для практических приложений время численное решение кинетического уравнения для задачи обтекания реалистичной модели спускаемого аппарата для условий задачи, соответствующих входу аппарата в атмосферу Земли с первой космической скоростью.

Практическая ценность Предложена методология моделирования, разработаны численные методы и созданы комплексы программ для параллельных вычислений, которые могут быть использованы в работе предприятий

аэрокосмического комплекса (РКК Энергия им. С.П. Королева) для проведения фундаментальных исследований в механике разреженного газа. Некоторые из предложенных методов могут применяться для решения уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений.

Замечания. Серьезных замечаний по материалам, представленным в содержательных главах диссертации, нет. Тем не менее, диссертационная работа не лишена ряда недостатков, в частности:

1. Предлагаемая методология решения пространственных течений разреженного газа отражает общие идеи, используемые при создании комплексов инженерного анализа для решения задач механики сплошных сред. Основными потребителями таких комплексов являются специалисты других специальностей: экспериментаторы, конструктора, расчетчики и т.д. Поэтому, в части методологии решения, по-видимому, больше надо было уделить внимание вопросам, как облегчить труд пользователей таких комплексов, у которых нет возможности проведения полномасштабных исследований при решении конкретных задач. В связи с этим также возникают следующие вопросы: возможно ли включение методов моделирования разреженных течений в коды инженерного анализа, как изменится методология решения и что для этого надо сделать?

2. Основное внимание при построении решения кинетического уравнения с приближенным интегралом столкновения уделено одноатомному газу, что может быть оправданно для течения в микроэлектромеханических устройствах. Однако для задач аэродинамики космических аппаратов большой интерес представляют двухатомные молекулы. Может ли развиваемый автором подход быть обобщен на многоатомные молекулы?

3. Во второй главе отмечается, что методика построена на использовании как многоблочных структурированных, так и произвольных неструктурированных сеток независимо в физическом и скоростном пространствах. Если в физическом пространстве использование неструктурированных сеток определяется геометрией задачи и возможностью генератора сеток, то для построения скоростной сетки дается только оценка линейного размера ячеек и нет информации о качестве скоростной

сетки и методах ее построения. Отметим, что частный пример построения скоростной сетки приводится только в пятой главе.

4. При представлении методик было бы желательно привести результаты численных исследований (расчеты на сходимость, порядок сходимости, зависимость результатов от способов реконструкции и т.д.) на задачах имеющих аналитическое или известное решение, которые бы демонстрировали возможности разработанных методик. Отметим, что такие исследования приведены в четвертой главе на одном классе задач.

5. По направлениям аэродинамики, гидродинамики, газовой динамики, прочности и т.д. создаются верификационные базы для проверки расчетных методик. Хотелось бы услышать позицию автора диссертации по вопросу создания верификационной базы для течения разреженного газа и возможности ее реализации.

6. При описании двухуровневого распараллеливания вычислений не указан способ декомпозиции расчётной сетки на верхнем уровне MPI-распараллеливания.

7. В настоящее время в современных процессорах реализована возможность векторизации вычислений. В связи с этим встает вопрос, почему в созданных автором пакетах программ не используется векторизация вычислений, которая является общепринятым третьим уровнем распараллеливания?

8. Для двухуровневого распараллеливания (MPI + OpenMP) указано ускорение в 1.5 раза по сравнению с чисто MPI-распараллеливанием. Было бы желательно привести условия проведения численного эксперимента: количество вычислительных ядер, количество MPI-процессов и количество OpenMP-потокков.

9. Не уточняется, есть ли в программе конфликты доступа к памяти при OpenMP-распараллеливании и способы решения этой проблемы.

10. В результате проведенных численных исследований дано обоснование применимости созданных автором расчетных моделей к решению широкого класса задач внутренних и внешних течений разреженного газа, однако отсутствуют яркие примеры использования результатов моделирования для решения практических задач, связанных с разработкой новых образцов техники.

Сделанные замечания имеют рекомендательный характер и не снижают ценности и достоверности полученных результатов.

Заключение. Диссертация написана на высоком научном уровне и показывает, что автор имеет высокую математическую культуру и может самостоятельно проводить полномасштабное научное исследование от анализа проблемы и постановки математических задач до разработки численных методов их решения, построения алгоритмов, реализации их в виде программ, проведения объемного вычислительного эксперимента, сопоставления результатов расчета с экспериментальными данными.

Анализ диссертации, автореферата и публикаций автора, соответствующих основному содержанию диссертации, позволяют сделать вывод, что работа Титарева В.А. посвящена актуальному направлению. Диссертация представляет собой законченное самостоятельное исследование, в котором приведены научные результаты, позволяющие их квалифицировать как решение крупной научной и практической проблемы в построении методов численного моделирования пространственных течений разреженного газа с использованием супер-ЭВМ.

Диссертационное исследование соответствует всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор Титарев Владимир Александрович заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент,
главный научный сотрудник
доктор физико-математических наук

15.03.2018

Ю.Н. Дерюгин

Подпись Ю.Н. Дерюгина заверяю,
ученый секретарь ФГУП-«РФЯЦ-ВНИИЭФ»
кандидат физико-математических наук



В.В. Хижняков

607188, г. Саров, Нижегородской обл. пр. Мира, 37

Телефон 8 (83130) 2-90-29, факс 8(83130) 4-47-61

E-mail: deryugin@vniief.ru