

"УТВЕРЖДАЮ"

Директор ИТ СО РАН

член-корр. РАН, д.ф.-м.н.

 Д. М. Маркович

15 марта 2018 г.



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертацию Титарева Владимира Александровича

"Численное моделирование пространственных течений

разреженного газа с использованием суперЭВМ",

представленной на соискание учёной степени

доктора физико-математических наук

по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование,

численные методы и комплексы программ»

Актуальность темы

Диссертационная работа Титарева В.А. посвящена решению практически важной и актуальной задачи – разработке новых численных алгоритмов и созданию комплексов параллельных программ для математического моделирования трехмерных течений разреженных газов вокруг тел сложной пространственной формы. Данная работа актуальна для корректного моделирования медленных течений в различных микроэлектромеханических устройствах, таких как микросопла, микронасосы и микротурбины, в системах охлаждения электронных компонентов, в различных вакуумных технологиях, а также для исследования аэродинамики и теплообмена космических аппаратов, движущихся в верхних слоях атмосферы. Для решения такого класса задач в настоящее время обычно используется метод прямого статистического моделирования, и на его основе в мире создан ряд программных пакетов. С другой стороны для исследования таких течений может быть использовано прямое численное решение кинетического уравнения Больцмана. В последние годы появляются программные комплексы, основанные на прямом решении кинетического уравнения. Однако эти программы пока мало пригодны для эффективного решения прикладных задач из-за низкого порядка аппроксимации по пространству, явного метода дискретизации по времени и необходимости использовать равномерную сетку

в пространстве скоростей. Данная работа фактически направлена на создание промышленного пакета для расчетов течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения с модельным интегралом столкновений. Особое внимание уделяется возможности решения практически важных задач со сложной геометрией области. Другой важной особенностью работы является создание эффективного параллельного алгоритма, которая позволяет проводить вычисления на современных суперЭВМ с десятками тысяч ядер/гиперпотоков.

Краткий анализ содержания работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы.

Во введении представлены соображения автора по поводу актуальности работы, сформулированы цели и задачи диссертации, отмечена научная новизна результатов и их практическая ценность, обоснована достоверность полученных результатов. Сформулированы основные положения диссертации, выносимые на защиту. Представлены сведения об апробации результатов исследований и изложена структура работы.

В первой главе излагается общая методология решения задач на основе кинетических уравнений. Представлены кинетические уравнения с точным и приближенным интегралом столкновений. Обосновывается выбор S-модельного уравнения Шахова для расчета течений разреженного газа. Описывается постановка граничных и начальных условий для расчетов. Описывается переход к безразмерной форме кинетического уравнения. Приводятся линеаризованные формы уравнения для решения задач с малыми отклонениями течения от покоя.

Вторая глава посвящена разработанному варианту численного метода решения кинетического уравнения в трехмерном случае. Обсуждаются основные трудности при численном решении кинетического уравнения в пространственном случае и формулируются требования к численным методам решения. Рассмотрена общая схема метода дискретных скоростей. Подробно излагается вычисление правой части разностной схемы. Оператор переноса аппроксимируется квази-монотонной схемой второго порядка при помощи метода наименьших квадратов. Расчет макроскопических величин основан на прямой аппроксимации условий на модельный интеграл столкновений. Приведено описание дискретизации по времени на основе неявной одношаговой схемы. Описывается метод решения линеаризованного кинетического уравнения для двухмерных течений.

В третьей главе работы приводится описание созданных автором программных комплексов "Несветай-2Д" и "Несветай-3Д". Подробно описана двухуровневая модель параллельных вычислений с учетом декомпозиции расчетной сетки. Представлено описание основного пакета программ "Несветай-3Д" с подробным изложением вычислительного ядра,

препроцессоров пространственной и скоростной сеток и решателя кинетического уравнения.

В четвертой главе работы представлены результаты численного решения стационарных задач течения разреженного газа в микроканалах. Представлены известные из литературы аналитические решения расхода массы для предельных случаев: свободномолекулярного течения в круглой трубе и течения в бесконечно длинной трубе с заданным градиентом давления на основе метода плоских сечений. Получено численное решение для бесконечного канала с поперечным сечением произвольной формы в широком диапазоне чисел Кнудсена. Представлено решение линеаризованного кинетического уравнения для течения через круглую трубу конечной длины при малом перепаде давлений. Приведено сравнение результатов вычислений с аналитическим решением задачи Пуайзеля для уравнений Навье-Стокса несжимаемой жидкости. Построено численное решение для истечения газа через круглую трубу постоянного радиуса для большого перепада давления. Получены решения для истечения газа через коническую трубу и через составную трубу, состоящую из двух цилиндрических секций разного радиуса, и через трубу переменного прямоугольного сечения. Получено хорошее согласие с результатами расчетов методом прямого статистического моделирования, решением уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений и экспериментальными данными. Продемонстрирована хорошая эффективность используемой параллельной реализации численного метода.

Пятая глава посвящена решению задач внешнего гиперзвукового обтекания тел потоком разреженного газа. Излагаются трудности, связанные с моделированием гиперзвуковых течений. Описывается алгоритм построения неравномерной сетки в пространстве скоростей применительно к задачам гиперзвукового обтекания тел. На примере обтекания круглого цилиндра показана хорошая точность при использовании S-модельного кинетического уравнения в задачах гиперзвукового обтекания затупленных тел. Проведены расчеты обтекания воздушно-космического аппарата реалистичной формы и затупленного сегментально-конического тела. Приведены данные по эффективности распараллеливания разработанного кода при решении задач внешнего обтекания на различных вычислительных кластерах.

Степень достоверности результатов проведенных исследований

Разработанный в работе программный комплекс верифицирован путем сопоставления с результатами расчетов методом прямого статистического моделирования, решением кинетического уравнения с точным интегралом столкновения, известными аналитическими решениями и экспериментальными данными, полученными другими исследователями. Параллельная эффективность программного комплекса подтверждается серией тестовых расчетов, выполненных на различных вычислительных системах с варьированием числа ядер в широком диапазоне.

Оценка новизны и практической значимости

Разработан новый неявный численный метод решения модельного кинетического уравнения, который позволяет моделировать на неструктурированных сетках течения разреженного газа для широкого диапазона режимов обтекания. Создан комплекс параллельных программ "Несветай-3Д", позволяющий эффективно проводить расчеты трехмерных течений вокруг тел сложной геометрии с использованием десятков тысяч процессоров. Впервые проведена верификация и валидация результатов численного решения кинетических уравнений с модельными интегралами столкновений на сложных пространственных задачах, включая задачи гиперзвукового обтекания тела потоком разреженного газа. Получен большой объем новых данных по течению газа в каналах для труб разной геометрии: круглой, конической, составной, с прямоугольным сечением. В целом результаты работы вносят большой вклад в теорию численного моделирования разреженного газа на основе решения модельного кинетического уравнения и в теорию течения газа в микроканалах.

Полученные в работе результаты и разработанные программные комплексы могут быть рекомендованы для использования в работе организаций, связанных с аэрокосмическими исследованиями и с разработкой вакуумных технологий, например в ЦАГИ, РКК "Энергия", МФТИ, МАИ, ВЦ РАН, ИТПМ СО РАН, ИТ СО РАН.

Замечания по диссертационной работе

1. Разработанный численный метод представляется как альтернатива методу прямого статистического моделирования (ПСМ), который является в настоящее время наиболее популярным инструментом для моделирования течений разреженного газа. В работе в нескольких местах представлены сравнения с результатами ПСМ расчетов, получено хорошее согласие. Однако в работе отсутствуют данные о трудоемкости разработанного численного алгоритма. В связи с этим не понятно, какой же численный подход, ПСМ или решение модельного уравнения, является более эффективным и менее ресурсозатратным для решения конкретных прикладных задач.

2. Не понятно, как связана трудоемкость численного алгоритма и число Кнудсена моделируемого течения. При каких минимальных числах Кнудсена можно рассчитывать трехмерное обтекание тел сложной геометрической формы? Возможно ли рассчитывать течения для режимов, близких к сплошной среде?

3. В диссертации представлены результаты по решению только стационарных задач. В связи с этим не понятно, насколько разработанный численный метод пригоден для решения нестационарных задач.

4. Существенным недостатком рассматриваемого метода является невозможность учитывать внутренние степени свободы молекул, рассчитывать

смеси газов и учитывать химические реакции. Это значительно ограничивает возможности метода для решения прикладных задач.

5. В формуле (4.1.2) расход газа через отверстие в безразмерном виде при свободномолекулярном течении представлен как $\dot{M}_0^{ome} = 2A / \sqrt{\pi}$, тогда как должно быть $\dot{M}_0^{ome} = A / (2\sqrt{\pi})$ (см. ссылку [141] диссертации).

6. В одном из основных выводов работы указано, что "применение метода к задаче гиперзвукового обтекания тел обеспечивает ускорение счета до 1000 раз по сравнению с общепринятыми схемами решения кинетических уравнений". Однако в тексте диссертации ничего не говорится о таком большом ускорении счета.

7. В одном из основных выводов работы написано: "Впервые проведена количественная оценка точности моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа на основе численного решения модельного кинетического уравнения. Показано, что при больших числах Маха около тела возникают параметры течения, которые соответствуют условию применимости S-модели." Однако именно *количественная* оценка точности в диссертации не приведена, есть просто демонстрация хорошего согласия с результатами ПСМ расчетов. При этом точность самого ПСМ решения не ясна. С другой стороны отметим, что условия применимости S-модели в диссертации в явном виде нигде не сформулированы. В целом в формулировке этого вывода не ясно, как связана информация о возникновении параметров течения, соответствующих условиям применимости S-модели, с количественной оценкой точности расчетов.

8. В диссертации встречается нечеткость в изложении результатов. Например, на стр. 132 в таблице 4.18 длина канала L является размерной величиной, а в формуле (4.5.16) на той же странице L является уже безразмерной величиной. При постулировании факта линейной зависимости изменения расхода от радиуса выходного сечения канала в формуле (4.6.27) желательно для наглядности в дополнение к представленной таблице (4.21) привести график получившейся зависимости.

Отмеченные недостатки не снижают общую положительную оценку работы и служат, скорее, рекомендациями для будущих исследований.

Заключение

В целом, диссертационная работа Титарева В.А. представляется законченным научным исследованием на актуальную тему, содержащим большое количество идей и предложений, реализованных в решении конкретных задач. Работа выполнена автором самостоятельно на высоком научном уровне.

Основные результаты работы и выводы представлены в автореферате. Автореферат соответствует основному содержанию диссертации. Результаты

диссертации опубликованы в высокорейтинговых рецензируемых научных журналах и сборниках трудов ведущих конференций по профилю работы.

Таким образом, диссертация Титарева В.А. является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований получены новые научные результаты, имеющие существенное значение для науки и практики. Совокупность полученных результатов можно квалифицировать как крупное научное достижение в области численного моделирования течений разреженного газа. Работа отвечает требованиям Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 "О порядке присуждения ученых степеней", предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук, а её автор, Титарев Владимир Александрович, заслуживает присуждения ему учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Отзыв обсужден и одобрен на семинаре лаборатории разреженных газов Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, протокол № 1 от 14 марта 2018 г.

Главный научный сотрудник,
академик РАН, д.ф.-м.н.



Ребров Алексей Кузьмич

Главный научный сотрудник,
д.ф.-м.н.



Сухинин Геннадий Иванович

Старший научный сотрудник,
к.ф.-м.н.



Плотников Михаил Юрьевич

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук (ИТ СО РАН)

630090, Новосибирск

пр. ак. Лаврентьева, 1

E-mail: director@itp.nsc.ru

Тел. +7(383) 330-90-40

Факс: +7(383) 330-84-80

<http://www.itp.nsc.ru>