

Raport stiintific sintetic

privind implementarea proiectului PN-II-ID-PCE-2011-3-0516 in perioada

octombrie 2011 – decembrie 2013

2011 - 2012:

A fost elaborat si testat un program de calcul paralel pentru curgerea unui fluid mono-fazic intre doua placi plan-paralele. Impulsurile particulelor componente ale fluidului au fost proiectate pe cele 3 axe carteziene, iar pe fiecare axa au fost folosite formulele de cuadratura Gauss-Hermite, respectiv Gauss-Laguerre. Pentru rezolvarea ecuatiilor de evolutie rezultate in urma discretizarii spatiului fazelor a fost folosita o schema numerica cu limitator de flux. Programul a fost testat si rulat pe sistemul de calcul paralel IBM Blue Gene / P de la Universitatea de Vest din Timisoara. A fost studiat profilul vitezei si temperaturii fluidului intre cele doua placi, precum si efectul numarului lui Knudsen asupra vitezei de alunecare si a saltului de temperatura la peretii canalului de curgere. Rezultatele obtinute au fost comparate atat cu cele obtinute prin metoda DSMC (Direct simulation Monte Carlo), existente in literatura, cat si cu rezultatele obtinute cu ajutorul unui alt model Lattice Boltzmann (SLB) in care sunt utilizate coordonate sferice. Aceste rezultate au fost prezentate oral la doua conferinte internationale din domeniu: 21st International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics, (DSFD 2012) July 23-27, Bangalore (India) si CECAM Workshop on Fluid-Structure Interaction in Soft-Matter Systems: From the Mesoscale to the Macroscale, November 27-30, Prato (Italy), constituind totodata si obiectul lucrarii "*Gauss quadratures – the keystone of Lattice Boltzmann models*" (autori: B.Piaud, S.Blanco, R.Fournier, A.E.Ambrus, V.Sofonea), publicata in volumul de Proceedings al conferintei DSFD-2012, aparut ca numar special al revistei International Journal of Modern Physics C, vol. 25 (2014), No. 1, 1340016 (8 pagini).

Dupa experimente preliminare, realizate in 2011 cu o placa grafica (GPU) Quadro 4000 avand 256 nuclee de procesare (cores), montata pe un system de calcul MacPro, in anul 2012 a fost achizitionat un sistem de calcul multi-cores dotat cu 4 (patru) placi grafice GPU nVIDIA Fermi M2090. Fiecare placa a acestui sistem poseda 512 nuclee de procesare (cores) si o memorie interna de 6 GB. Pe acest sistem a fost elaborat o prima versiune a unui program lattice Boltzmann pentru modelarea sistemelor lichid-vapori, program care utilizeaza biblioteca CUDA. Strategia utilizata la elaborarea acestui program, precum si cateva tehnici de optimizare implementate in anul urmator (2013) in cadrul programului, au constituit subiectul dizertatiei de masterat "*Fluid dynamics simulation with Lattice Boltzmann models using CUDA enabled GPGPUs*", elaborata de dl. ing. Adrian Horga, membru al echipei de cercetare implicate in acest proiect. Dizertatia a fost sustinuta in iunie 2013 la Departamentul de Calculatoare si Inginerie Software al Universitatii Politehnica din Timisoara.

2013:

Programul Lattice Boltzmann bazat pe cuadratura Gauss-Hermite si extins in anii 2011-2012 in cazul sistemelor lichid-vapori, care a fost initial optimizat pentru sistemul de calcul IBM Blue Gene /P in 2 versiuni (2D si 3D), a fost completat prin includerea functionalelor Minkowski si utilizat la studiul

evolutiei morfologiei fazelor in cursul procesului de separare lichid-vapori. Rezultatele au constituit subiectul dizertatiei de masterat "*Lattice Boltzmann models for multiphase systems*", elaborata de dl. fiz. Tonino Biciusca, membru al echipei de cercetare implicate in proiect. Dizertatia a fost sustinuta in iulie 2013 la Departamentul de Fizica al Universitatii de Vest din Timisoara. Aceste rezultate au constituit si obiectul a doua postere, primul fiind prezentat la Conferinta de Fizica TIM-12 (Timisoara, 27-30 noiembrie 2012), iar cel de-al doilea, intitulat "*Lattice Boltzmann simulation of phase separation in liquid – vapour systems*" (autori: T.Biciusca si V.Sofonea) a fost prezentat la 10th International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science (ICMMES), July 22-26, 2013, University of Oxford (United Kingdom).

Pentru a reduce erorile cauzate de implementarea conditiilor pe frontiera domeniului de curgere, care implica calculul momentelor functiei de distributie a lui Boltzmann prin integrare pe jumatate din spatiul impulsurilor, modelul Lattice Boltzmann bazat pe cuadratura Gauss-Laguerre a fost aprofundat ,iar rezultatele obtinute cu cele doua versiuni ale acestuia (versiuni bazate pe dezvoltarea in serie a functiei de echilibru, si respectiv pe proiectarea directa a acestei functii pe baza ortogonala generata de polinoamele Laguerre) au fost prezentate la 22nd International Conference on the Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD-2013), July 15-19, 2013, Yerevan (Armenia), si respectiv la Conferinta de Fizica TIM-13, organizata in 21-14 Noiembrie 2013 la Timisoara. Descrierea detaliata a fiecarei versiuni a modelului Lattice Boltzmann bazat pe cuadratura Gauss-Laguerre, precum si rezultatele obtinute pe calculator constituie obiectul a doua lucrari elaborate in cursul anului 2013: "*Implementation of diffuse reflection boundary conditions using lattice Boltzmann models based on Gauss-Laguerre quadratures*" (autori: V.E.Ambrus si V.Sofonea) care a fost trimisa la Physical Review E in luna august, si respectiv "*Lattice Boltzmann models based on Gauss quadratures*" (autori: V.E.Ambrus si V.Sofonea), trimisa in cursul lunii noiembrie pentru volumul de Proceedings al conferintei DSFD-2013 care va apare ca numar special al revistei International Journal of Modern Physics C. In prezent, aceste doua lucrari se afla in proces de evaluare.

Director proiect,

Dr. fiz. Victor Sofonea


