

## PARALEL MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYONLARI İLE TÜRBÜLANSLI AKIŞLARIN İNCELENMESİ

Ali Ata ADAM\* , Nilay SEZER-UZOL† ve Cahit ÇIRAY‡  
Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Ankara

İsmail KABAKCI§  
Roketsan A.Ş., Ankara

### ÖZET

*Moleküler dinamik simülasyonları sürekli ortam varsayımının uygun olmadığı akış problemleri için kullanılabilir ve bu tür akış simülasyonlarında türbülans mikro ölçekte incelenebilir. Bu çalışmada, daha önce geliştirilmiş moleküler dinamik simülasyon kodu, grafik işlem birimi üzerinde CUDA ile paralel hale getirilerek çalıştırılmıştır. Bu sayede yüksek sayıda molekül ile seçilen akış problemleri için zamana bağlı simülasyonlar yapılmış ve moleküler akışı karakteristikleri farklı kütle hızlarında incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar sonucunda moleküler topaklaşmanın türbülansın temel elemanlarından biri olan çvrintiye benzer şekilde oluştuğu ve yok olduğu gözlemlenmiştir. Buna ek olarak topaklaşma ile kütle hız arasındaki ilişki de gösterilmiştir.*

### GİRİŞ

Paralel bilgisayarların hesaplama güçlerinin artması ve Yüksek Başarımlı Hesaplama (YBH) uygulamalarının yardımıyla birlikte Navier-Stokes denklemlerinin Büyük Girdap Benzetimi (LES) yöntemi ile çözülmesiyle türbülanslı akışlar yüksek doğruluk oranları ile modellenebilmektedir. Doğrudan Sayısal Benzetim (DNS) yöntemi ile birçok problem için daha doğru çözümler elde edilebilmesi ise halen oldukça pahalıdır. Sürekli ortam varsayımı ile Navier-Stokes denklemlerinin sayısal çözümünde, türbülans yapılarının anlaşılması ve doğru modellenebilmesi de oldukça zordur. Bu sebeple moleküler dinamik (MD) simülasyonları gibi daha mikro ölçekli yöntemler ile türbülansın incelenmesi ve türbülanslı yapıların anlaşılabilmesi daha isabetli bir uygulama olabilmektedir.

Akışkan mekaniğinde karşılaşılan fiziksel olayları incelemek için MD simülasyonları oldukça yararlı birer araçtır. Literatürde yapılan çalışmalar incelendiğinde MD simülasyonları ile sürekli ortam varsayımını kullanan yöntemler arasında makro ölçekte yakın bir ilişki gözlemlendiği fakat mikro ölçekte MD simülasyonları ile eşsiz bulgulara ulaşılabileceği anlaşılmaktadır [Koplik, Banavar ve Willemsen, 1989]. Rapaport ve Clementi [1986] dairesel bir silindirin akış aşağı yönünde oluşan

\* Araştırma görevlisi, Havacılık ve Uzay Müh. Böl., E-posta: adam@metu.edu.tr

† Doç. Dr., Havacılık ve Uzay Müh. Böl., E-posta: nuzol@metu.edu.tr

‡ Prof.(E) Dr., Havacılık ve Uzay Müh. Böl., E-posta: cciray@metu.edu.tr

§ Uzay Sistemleri Proje Yönetim Lideri, E-posta: ismail.kabakci@roketan.com.tr

çevrintileri MD yöntemi ile incelemişken, Asano, Watanabe ve Noguchi [2020] sıralanmış iki tane dairesel silindir üzerindeki akışı, kovuklaşmanın burgaç oluşumu üzerindeki etkilerini incelemek için MD simülasyonları yapmıştır. Türbülanslı akışlardaki yapıların yanı sıra akış kararlılığı konularında da MD yoluyla araştırmalar yapılmaktadır. Dzwinel, Alda, Pogoda ve Yuen [2000] Rayleigh-Taylor kararsızlığını ve türbülanslı karışmayı moleküler ölçekte inceleyerek yarı-empirik bir denklem geliştirmiştir. Raghavan ve Ostoja-Starzewski [2019] ise MD simülasyonlarını kullanarak bir Couette akışı içerisindeki akış kararsızlığını ve laminar-türbülans geçişini incelemiş ve akış kararlılığının sistem hacmine bağlı olduğunu göstermiştir.

MD simülasyonlarıdaki zaman adımları genellikle pikosaniye veya femtosaniye mertebesinde olmaktadır. Bu sebeple, çok sayıda zaman adımının çözülmesi gerekmektedir. Örnek olarak, bir moleküler akış probleminin çözümü için Asano, Watanabe ve Noguchi [2020] on milyon ve Raghavan ve Ostoja-Starzewski [2019] yirmi altı milyon zaman adımı uzunluğunda simülasyonlar yapmışlardır. Bu sebeple, MD simülasyonlarının hesaplama güç ihtiyacı çok yüksektir. Gallis vd. [2017] moleküler düzeyde türbülanslı Monte-Carlo simülasyonları yoluyla incelemek için bir MD simülasyonunu yarım milyon işlemci çekirdeği üzerinde yaklaşık üç hafta koşturmuştur. Bu sebeple MD simülasyon kodlarının hesaplama açısından verimli olması ve yüksek oranda paralelleştirilmiş olması büyük önem taşımaktadır.

Differansiyel denklemlerin çözüldüğü konvansiyonel yöntemlerden [Gallis vd., 2017; Raghavan ve Ostoja-Starzewski, 2019; Asano, Watanabe ve Noguchi, 2020] farklı olarak Çıray [2015] basit gaz moleküllerinin hareketini Newton'un ikinci hareket kanunu ile açıklayan ve basit cebirsel denklemler üzerinden hesaplama yapılan bir yöntem geliştirmiştir. Bu yöntem baz alınarak iki boyutlu sayısal uygulamalar yapılmış [Eneren ve Çıray, 2015] ve buna ek olarak bir ve üç boyutlu doğrulama simülasyonları gerçekleştirilmiştir [Eneren, 2016]. Kabakçı, Çıray ve Çöker [2019] moleküller arasındaki etkileşim sonrasındaki potansiyel değişimini moleküllerin hız değişimi için hesaba katarak bu yöntemin doğruluk seviyesini artırmıştır. Daha sonrasında üç boyutlu ısı yayılım simülasyonları ile yöntemdeki iyileştirme uygulamalı olarak gösterilmiş ve teorik değerler ile uyumlu sonuçlar elde edilmiştir [Kabakçı, 2019]. Aynı çalışmada üç boyutlu bir çözüm hacmi içerisinde tek yönlü bir akış simülasyonu da gerçekleştirilmiştir. Bu yapılan analizler sonucunda türbülans ile alakalı mikro ölçekte bulgular elde edilebilse de [Çıray, 2020], Kabakçı [2019] makro ölçekteki bir türbülanslı akışın incelenmesi için simüle edilen molekül sayısının ve simülasyon süresinin artırılması gerektiğini belirtmiştir.

Bu çalışmada, ilk olarak Çıray [2015] tarafından geliştirilen ve daha sonrasında Kabakçı [2019]'nın iyileştirdiği model ile moleküler seviyede akışkan davranışı incelenecektir. Bu model baz alınarak geliştirilmiş bir MATLAB kodu, C programlama dili ile tekrar yazılarak hızlandırılmıştır. Daha sonra grafik işlem birimi (GPU) üzerinde paralel çalışmak üzere CUDA kütüphanesi ile paralel programlanmıştır. Böylelikle çok sayıda molekülün hareketi aynı anda hesaplanabilecek ve çok sayıda molekül yüksek miktarda zaman adımı boyunca simüle edilebilecektir. Elde edilen sonuçlar teorik veriler ile karşılaştırıldıktan sonra Çıray [2020] tarafından topak olarak adlandırılan molekül grupları incelenecek ve bunların türbülans ile bağlantısı tartışılacaktır.

## YÖNTEM

### Basit Moleküller

Bu çalışmada kullanılan model ile basit moleküllerin hareketi hesaplanabilir. Basit moleküller kendi eksenini etrafında dönüşü olmayan yapılardır. Moleküller yalnızca teke tek etkileşime girmiş olduğu molekül ile kendisinin kütle merkezleri arasındaki doğrusal etkileşim kuvvetine mağruz kalmaktadır ve elektriksel veya elektromanyetik kuvvetlerin etkisi yok sayılmaktadır. Basit moleküller genellikle

iyonize olmazlar ve kimyasal bağ oluşturmazlar [Eneren, 2016]. Tek atomlu molekül şeklinde doğada bulunan soygazlar basit molekül olarak kabul edilebilmektedir.

### Model Denklemleri

Moleküllerin hareketini hesaplamak için Newton'un ikinci hareket yasasından ve kuvvet potansiyeli teorisinden yararlanılmıştır. Basit bir molekülün üzerindeki kuvvetler ( $\mathbf{F}_i$ ) diğer moleküller ile olan etkileşim kuvvetlerinin ( $\mathbf{F}_{ij}^*$ ) toplamı ile ifade edilebilir

$$\mathbf{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{F}_{ij}^* \quad (1)$$

ve etkileşim kuvveti Newton'un ikinci yasası ile aşağıdaki şekilde gösterilebilir:

$$\mathbf{F}_{ij}^*(r_{ij}^*) = m_i \frac{d\mathbf{U}_i^*}{dt} = m_i \frac{d\mathbf{U}_i^*}{dr_{ij}^*} \frac{dr_{ij}^*}{dt} \quad (2)$$

Bu denklemde  $r_{ij}^*$  etkileşimde olan  $i$  ve  $j$  moleküllerinin arasındaki mesafeyi ve  $\mathbf{U}_i$  de  $i$  molekülünün hızını ifade eder.  $r_{ij}^*$  ifadesi zincir kuralı kullanılarak açılabilir:

$$\mathbf{F}_{ij}^*(r_{ij}^*) = m_i \frac{d\mathbf{U}_i^*}{dr_{ij}^*} \left( \frac{dr_{ij}^*}{dx_{ij}^*} \frac{dx_{ij}^*}{dt} + \frac{dr_{ij}^*}{dy_{ij}^*} \frac{dy_{ij}^*}{dt} + \frac{dr_{ij}^*}{dz_{ij}^*} \frac{dz_{ij}^*}{dt} \right) \quad (3)$$

$r_{ij}^*$  değerinin  $i$  ve  $j$  moleküllerinin pozisyon vektörlerinin farkının büyüklüğünü ifade ettiği bilgisi kullanıldığında Denklem 3 aşağıdaki şekilde sadeleştirilebilir:

$$\mathbf{F}_{ij}^*(r_{ij}^*) = m_i \frac{d\mathbf{U}_i^*}{dr_{ij}^*} \left( \frac{x_{ij}^*}{r_{ij}^*} U_{x,ij}^* + \frac{y_{ij}^*}{r_{ij}^*} U_{y,ij}^* + \frac{z_{ij}^*}{r_{ij}^*} U_{z,ij}^* \right) = m_i \frac{\mathbf{r}_{ij}^* (\mathbf{U}_i^* - \mathbf{U}_j^*)}{r_{ij}^*} \frac{d\mathbf{U}_i^*}{dr_{ij}^*} \quad (4)$$

Etkileşimde olan iki molekül üzerindeki kuvvetlerin büyüklüğünün birbirine eşit ve yönlerinin zıt olduğu bilgisi kullanıldığında Denklem 4 aşağıdaki formu almaktadır:

$$\mathbf{F}_{ij}^*(r_{ij}^*) = m_i \frac{\mathbf{r}_{ij}^*}{r_{ij}^*} \left( \mathbf{U}_i^* \frac{d\mathbf{U}_i^*}{dr_{ij}^*} - \mathbf{U}_j^* \frac{d\mathbf{U}_j^*}{dr_{ij}^*} \right) = m_i \frac{\mathbf{r}_{ij}^*}{r_{ij}^*} \left[ \frac{d}{dr_{ij}^*} \left( \frac{U_i^{*2}}{2} \right) + \frac{m_j}{m_i} \frac{d}{dr_{ij}^*} \left( \frac{U_j^{*2}}{2} \right) \right] \quad (5)$$

$i$  ve  $j$  molekülleri arasındaki etkileşim kuvveti Newton'ın ikinci hareket yasasına ek olarak potansiyel teoremindeki kuvvet potansiyeli  $\psi_{ij}$  değişkeni ile aşağıdaki şekilde hesaplanabilir:

$$\mathbf{F}_{ij}^*(r_{ij}^*) = -\nabla_{\mathbf{r}_i^*} \psi_{ij}(r_{ij}^*) \quad (6)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^*(r_{ij}^*) = -\frac{\partial r_{ij}^*}{\partial \mathbf{r}_i^*} \frac{d\psi_{ij}(r_{ij}^*)}{dr_{ij}^*} \quad (7)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^*(r_{ij}^*) = -\frac{\mathbf{r}_{ij}^*}{r_{ij}^*} \frac{d\psi_{ij}(r_{ij}^*)}{dr_{ij}^*} \quad (8)$$

Moleküller arasındaki etkileşim kuvvetini veren Denklem 5 ve 8 birleştirildiğinde hız değişimi ile potansiyel değişimi arasında bir ilişki kuran diferansiyel bir denklem elde edilmektedir:

$$\mathbf{F}_{ij}^*(r_{ij}^*) = m_i \frac{\mathbf{r}_{ij}^*}{r_{ij}^*} \left[ \frac{d}{dr_{ij}^*} \left( \frac{U_i^{*2}}{2} \right) + \frac{m_j}{m_i} \frac{d}{dr_{ij}^*} \left( \frac{U_j^{*2}}{2} \right) \right] = - \frac{\mathbf{r}_{ij}^*}{r_{ij}^*} \frac{d\psi_{ij}(r_{ij}^*)}{dr_{ij}^*} \quad (9)$$

$$\frac{1}{2} \left( m_i \frac{dU_i^{*2}}{dr_{ij}^*} + m_j \frac{dU_j^{*2}}{dr_{ij}^*} \right) + \frac{d\psi_{ij}^*}{dr_{ij}^*} = 0 \quad (10)$$

Denklem 10 model içerisinde kinetik ve potansiyel enerjinin toplamının sabit olduğunu ve toplam enerjinin korunduğunu göstermektedir. Bu denklemin integrali bir zaman adımı içerisinde alındığında,

$$\left[ U_i^{*2}(t + \Delta t) - U_i^{*2}(t) + \frac{m_j}{m_i} \left( U_j^{*2}(t + \Delta t) - U_j^{*2}(t) \right) \right] + \frac{2}{m_i} (\psi_{ij}^*(t + \Delta t) - \psi_{ij}^*(t)) = 0 \quad (11)$$

$$\Phi_{ij}^* := \psi_{ij}^*(t + \Delta t) - \psi_{ij}^*(t) \quad (12)$$

Denklem 12'de  $\Phi_{ij}^*$  terimi  $i$  ve  $j$  molekülleri arasındaki etkileşimden dolayı bir zaman adımındaki potansiyel değişimi ifade edecek şekilde tanımlanmıştır. Etkileşimdeki iki molekülün bu etkileşimden dolayı oluşacak hız değişimleri arasında momentumun korunumu ile bir ilişki kurulabilir:

$$\Delta U_j^*(i, \Delta t) = - \frac{m_i}{m_j} \Delta U_i^*(j, \Delta t) \quad (13)$$

Denklem 13, Denklem 11'e yerleştirildiğinde aşağıda verilen denklem elde edilir:

$$\begin{aligned} \left( 1 + \frac{m_i}{m_j} \right) [\Delta U_{x,i}^2(j, \Delta t) + \Delta U_{y,i}^2(j, \Delta t) + \Delta U_{z,i}^2(j, \Delta t)] + \\ 2 [ (U_{x,i}^*(t) - U_{x,j}^*(t)) \Delta U_{x,i}^*(j, \Delta t) + \\ (U_{y,i}^*(t) - U_{y,j}^*(t)) \Delta U_{y,i}^*(j, \Delta t) + \\ (U_{z,i}^*(t) - U_{z,j}^*(t)) \Delta U_{z,i}^*(j, \Delta t)] + \\ \frac{2}{m_i} \Phi_{ij}^*(\Delta t) = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

Moleküllerin hız değişimini belirleyebilmek için her bir zaman adımı sonundaki potansiyelin hesaplanması gerekmektedir. İki molekül arasındaki potansiyel Lennard-Jones (LJ) potansiyel modeli [Jones, 1924] ile hesaplanabilir:

$$\psi_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (15)$$

Denklem 15'de  $\epsilon$  potansiyel kuyusunun derinliğini ve  $\sigma$  da iki parçacık arasındaki potansiyelin sıfır olduğu uzaklığı veya başka bir deyişle Van der Waals yarıçapını temsil etmektedir.

$\Phi_{ij}^*$  terimini belirlemek için öncelikle Denklem 8 ve 15 birleştirilmelidir:

$$\mathbf{F}_{ij}^*(r_{ij}^*) = -\frac{\mathbf{r}_{ij}^*}{r_{ij}^*} \frac{d}{dr_{ij}^*} \left\{ 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}^*} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}^*} \right)^6 \right] \right\} = \frac{\mathbf{r}_{ij}^*}{r_{ij}^*} \frac{24\epsilon}{r_{ij}^*} \left[ 2 \left( \frac{\sigma}{r_{ij}^*} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}^*} \right)^6 \right] \quad (16)$$

Küçük bir zaman adımı kullanılması durumunda sabit bir ivme varsayımı geçerli sayılabilir. Böyle bir durumda molekülün zaman adımının sonundaki pozisyonu aşağıdaki şekilde belirlenebilir:

$$\mathbf{r}_{ij}^*(t + \Delta t) = \mathbf{r}_{ij}^*(t) + \left\{ \left( \frac{m_i + m_j}{m_i m_j} \right) \frac{12\epsilon}{r_{ij}^{*2}(t)} \left[ 2 \left( \frac{\sigma}{r_{ij}^*(t)} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}^*(t)} \right)^6 \right] \mathbf{r}_{ij}^*(t) \right\} \Delta t^2 \quad (17)$$

Denklem 17'den elde edilecek pozisyon kullanılarak zaman adımının sonundaki potansiyel belirlenip  $\Phi_{ij}^*$  teriminin değeri hesaplanabilir.

Zaman adımının sonunda moleküllerin hızını belirleyebilmek için etkileşim kuvvetinin  $\mathbf{r}_{ij}^*$  vektörü ile aynı yönde olduğu bilgisi kullanılarak Denklem 14 aşağıdaki şekilde düzenlenebilir ve  $i$  molekülünün  $j$  molekülü ile etkileşimi sonucundaki hız değişimi hesaplanabilir:

$$\begin{aligned} & \left( 1 + \frac{m_i}{m_j} \right) \frac{k^2}{k_x} \Delta U_{x,i}^*(j, \Delta t) \\ & + 2 [(U_{x,i}^*(t) - U_{x,j}^*(t)) k_x + (U_{y,i}^*(t) - U_{y,j}^*(t)) k_y + (U_{z,i}^*(t) - U_{z,j}^*(t)) k_z] \Delta U_{x,i}^*(j, \Delta t) \\ & + \frac{2k_x}{m_i} \Phi_{ij}^*(\Delta t) = 0 \end{aligned} \quad (18)$$

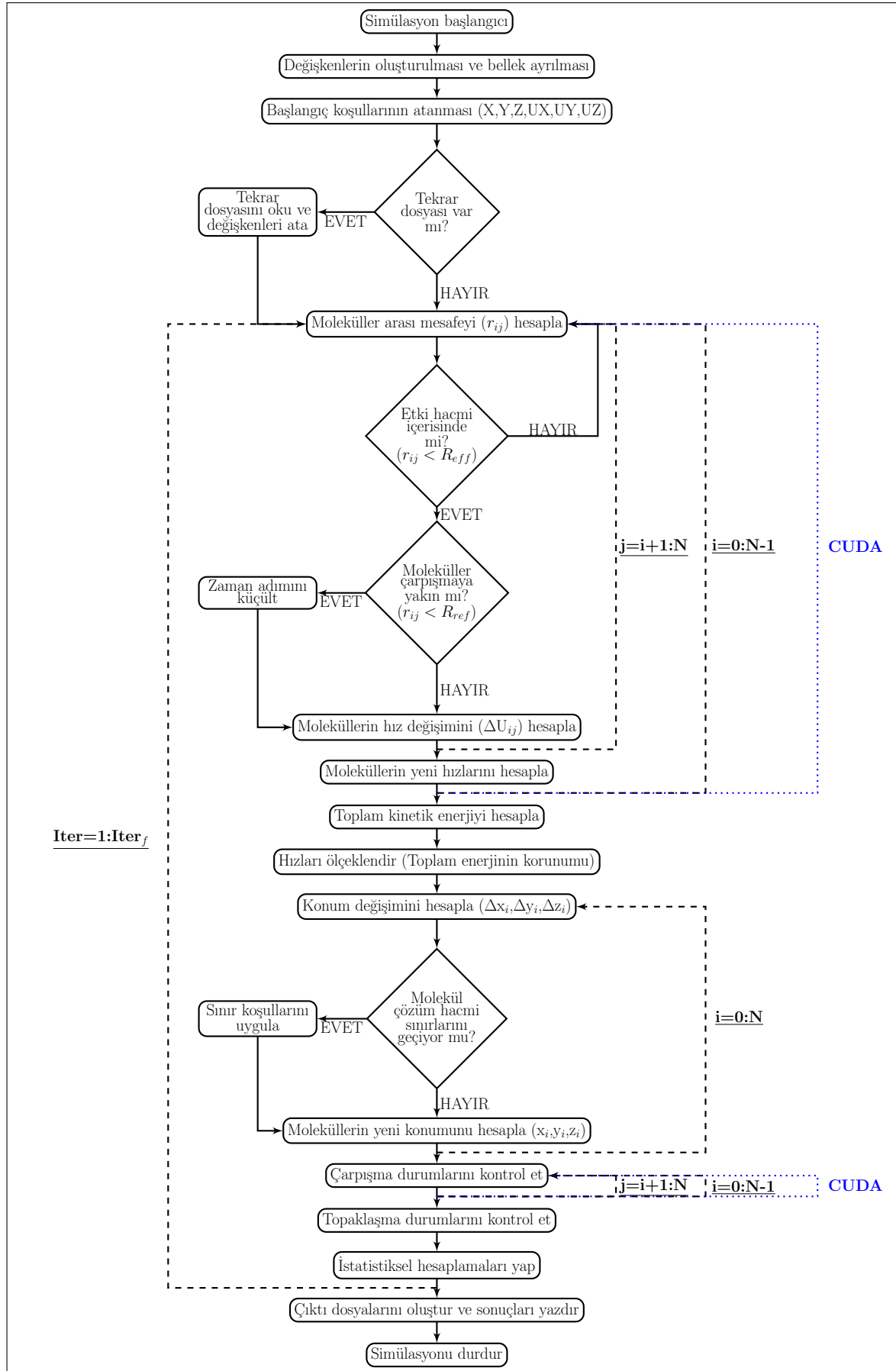
$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \quad (19)$$

$$\frac{\Delta U_{x,i}^*(j, \Delta t)}{\Delta U_{y,i}^*(j, \Delta t)} = \frac{k_x}{k_y} = \frac{\Delta x(t + \Delta t)r_{ij}(t) + \Delta x(t)r_{ij}(t + \Delta t)}{\Delta y(t + \Delta t)r_{ij}(t) + \Delta y(t)r_{ij}(t + \Delta t)} \quad (20)$$

$$\frac{\Delta U_{x,i}^*(j, \Delta t)}{\Delta U_{z,i}^*(j, \Delta t)} = \frac{k_x}{k_z} = \frac{\Delta x(t + \Delta t)r_{ij}(t) + \Delta x(t)r_{ij}(t + \Delta t)}{\Delta z(t + \Delta t)r_{ij}(t) + \Delta z(t)r_{ij}(t + \Delta t)} \quad (21)$$

## Paralleştirme ve Bilgisayar Kodu

MD uygulamaları çok fazla sayıda molekül içerdiğinden dolayı yüksek miktarda çekirdek içeren GPU donanımları üzerinden paralelleştirilmeleri oldukça uygundur. Bu sebeple, daha öncesinde Eneren [2016] ve Kabakçı [2019] tarafından geliştirilen MATLAB kodu C programlama diline dönüştürülmüştür. Yapılan testler sonucunda moleküler etkileşimleri hesaplayan ve moleküllerin çarpışma durumlarını belirleyen iki fonksiyonun bir simülasyon için gereken hesaplama süresinin çoğunluğuna sebep olduklarından dolayı paralelleştirmenin bu iki fonksiyon için yapılması kararlaştırılmıştır. Bu iki fonksiyon içerisinde  $N$  sayıda molekül içeren bir simülasyon için  $N(N-1)/2$  sayıda döngüsel işlem yapıldığından dolayı GPU üzerinde paralelleştirmesi uygundur. Bilgisayar kodunun akış şeması Şekil 1'de gösterilmiştir. Ek olarak, GPU paralelleştirmesi için CUDA kütüphanesinin uygulandığı kısımlar da şekil içerisinde ifade edilmektedir. Orijinal kodun ayrıntılı



Şekil 1: Bilgisayar kodunun akış şeması

açıklaması [Kabakcı, 2019]'da verilmiştir. Bu çalışma için yapılan simülasyonlarda Xeon 6148 2.40GHz işlemcisi ve Nvidia P100 GPU donanımları kullanılmıştır.

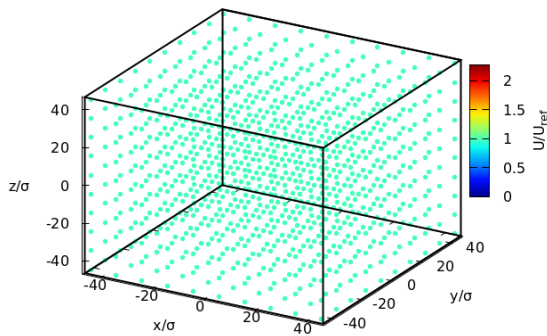
## UYGULAMALAR VE DEĞERLENDİRME

### Doğrulama Simülasyonu

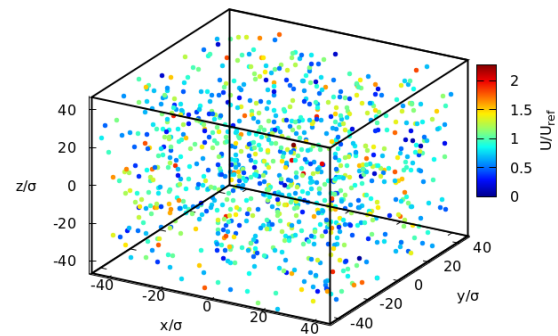
Doğrulama simülasyonu için 1000 adet argon molekülünü içeren bir kapalı kutu problemi seçilmiştir. 300 K sıcaklığındaki argon molekülleri Şekil 2'deki bir başlangıç koşulunda  $93x_{ref}$  uzunluğundaki ayrıtlara sahip bir küpün içerisine yerleştirilmiş ve 762 ps uzunluğunda bir süre için simüle edilmiştir. Kabakcı [2019]'nın önerdiği üzere zaman adımı  $\Delta t = 0,05t_{ref}$  olarak seçilmiştir. Böylelikle simülasyonlar 20.000 zaman adımı kadar sürmüştür. Tüm yüzeylerde çarpışma sırasında elastik bir sekmenin uygulandığı duvar koşulu kullanılmıştır. Yapılan doğrulama simülasyonlarında kütleli hız verilmemiştir.

Bu ve sonraki başlıkta verilen simülasyonlardaki parametreler boyutsuzdur. Koordinat, hız ve zaman parametreleri sırasıyla argon molekülünün Van der Waals yarıçapı ( $x_{ref} = \sigma = 3,405 \text{ \AA}$ ), referans hız ( $U_{ref} = \sqrt{8\epsilon/m} = 446,7 \text{ m/s}$ ) ve referans zaman ( $t_{ref} = \sigma/U_{ref} = 0,762 \text{ ps}$ ) ile boyutsuzlaştırılmıştır. Referans hız için kullanılan denklemden argon molekülünün potansiyel kuyusunun derinliğini ve  $m$  molekül ağırlığını ifade etmektedir.

Moleküllerin simülasyon sonundaki pozisyonları ve süratleri Şekil 3'de gösterilmiştir. Seri ve paralel C kodu ile elde edilen sonuçlar teorik Maxwell-Boltzmann dağılımından ve Kabakcı [2019]'nın geliştirdiği MATLAB kodundan gelen veriler ile Tablo 1'te karşılaştırılmıştır. Simülasyon sonuçlarının teoriden gelen sonuçlar ile farkı parantez içerisinde verilmiştir. Sonuçların gösterdiği üzere seri ve paralel C kodundan gelen sonuçlar hem birbirleri ile hem de MATLAB kodundan gelen sonuçlar ile tutarlıdır. Buna ek olarak kullanılan yöntem ile elde edilen sonuçlar Maxwell-Boltzmann dağılımından gelen değerler ile yüksek oranda uyumaktadır. Buna rağmen kodlardan elde edilen sonuçlar arasında küçük farklılıklar bulunmaktadır. MATLAB kodunda tekrar dosyası özelliği bulunmadığından dolayı farklı simülasyonlar için aynı başlangıç koşulu sağlanamamaktadır. Bu sebeple her bir koşturmada farklı sonuçlar elde edilmesi beklendiğinden oluşan küçük farklılıklar normaldir.



Şekil 2: Argon moleküllerinin doğrulama simülasyonundaki başlangıç konumları ve süratleri



Şekil 3: Argon moleküllerinin doğrulama simülasyonunun sonundaki ( $t = 762 \text{ ps}$ ) konumları ve süratleri

Tablo 1'de farklı kodların hesaplama süreleri de verilmiştir. MATLAB kodunun C koduna dönüştürülmesi ile dörtte üç oranından fazla bir hesaplama süresi kazancı elde edilmiştir. Bunun üzerine yapılan CUDA paralelleştirmesi sayesinde bu simülasyon özelinde hesaplama süresinde seri

koda göre %80'e yakın düşüş gözlemlenmiştir. Toplamda, bir başka deyişle MATLAB kodunun CUDA C koduna dönüştürülmesiyle, ihtiyaç duyulan hesaplama süresi %95'e yakın oranda düşmüştür. Böylelikle daha geniş çözüm hacimlerinde yüksek sayıda molekül ile daha çok sayıda zaman adımı boyunca mikro ölçekli simülasyonlar daha düşük hesaplama gücüne ihtiyaç duyularak yapılabilecek ve makro ölçekli bulguların elde edilebileceği analizler yapılabilecektir.

Tablo 1: Doğrulama simülasyonu sonuçları

	Hesaplama süresi [s]	En muhtemel hız [m/s]	Ortalama hız [m/s]	Hız kare ort. kökü (RMS) [m/s]	Sınır yüzey. basınç [kPa]
Teorik	-	353,39	398,76	432,81	130,44
MATLAB Kodu	722,4	353,37 (-% 0,01)	400,25 (% 0,37)	432,85 (% 0,01)	130,03 (-% 0,31)
Seri C Kodu	170,0	353,41 (% 0,01)	397,94 (-% 0,20)	432,84 (% 0,01)	130,26 (-% 0,13)
Paralel C Kodu	34,8	353,38 (% 0,00)	401,10 (% 0,59)	432,84 (% 0,01)	130,14 (-% 0,23)

### Molekül Topaklaşması

Moleküllerin birbirine yaklaşımları ile türbülanslı akışın içerisinde görünen çevrıntilerin olduğu bilinmektedir. Çiray [2020] moleküllerin birbirine hareketlenmelerini topaklaşma ve oluşan yapıyı bebek-çevrinti olarak ifade etmiştir. Bu çalışmada moleküllerin topaklaşma öncesi ve sonrasındaki hareketleri ile çözüm hacmi içerisindeki topaklaşma miktarının ve büyüklüğünün farklı kütleli hızlardaki değişimi incelenmiştir.

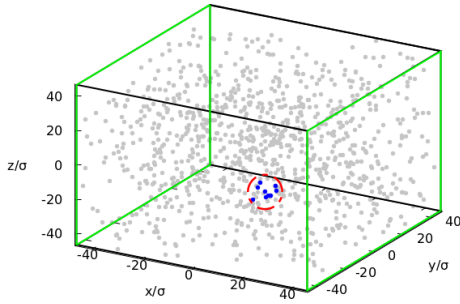
Bu başlık altındaki sonuçların elde edildiği simülasyonlardaki molekül sayısı, simülasyon süresi ve molekül sıcaklıkları doğrulama simülasyonu ile aynıdır. Normal vektörü  $x$  ekseninde olan yüzeylerde periyodik sınır koşulu uygulanmışken, diğerlerinde çarpışma sırasında elastik bir sekmenin uygulandığı duvar koşulu kullanılmıştır. İlk durum için öncelikle moleküllerin sıcaklıklarından dolayı oluşan hızlarının yönü her bir molekül için rastgele bir şekilde verilmiştir. Daha sonrasında bu hız vektörüne kütleli hız eklenmiştir. Yapılan simülasyonlarda çeşitli kütleli hızlar ( $U_x/U_{ref} = 0,0, 0,2, 0,4, 0,6, 1,0$  ve  $2,0$ ) kullanılmıştır. Doğrulama simülasyonundan farklı olarak iki farklı çözüm hacminde simülasyon yapılmıştır. Geniş olan çözüm hacminin bir ayrıtı  $93\sigma$  ve dar olanı  $23,25\sigma$  uzunluğundadır. İki çözüm hacmi arasında 64 kat hacim farkı bulunmaktadır. Molekül sayısı sabit tutulduğundan dolayı aynı fark akışkan yoğunluğu için de geçerlidir. Ek olarak, yüksek kütleli hızlarda Kabakcı [2019]'nın önerdiği zaman adımının yetersiz kaldığı ve yüksek oranda hataya sebep olduğu gözlemlenmiştir. Bu sebeple bu başlık altındaki simülasyonlarda daha düşük bir zaman adımı tercih edilmiştir:  $\Delta t = 0,005t_{ref}$ .

Moleküllerin arasındaki mesafe Şekil 1'de görülebileceği gibi iki molekülün arasındaki etkileşimi hesaplamak için bilgisayar programının hesaplama maliyetini düşürmek adına bir koşul olarak belirlenmiştir. Kabakcı [2019]'nın gösterdiği üzere  $R_{ij} < R_{eff} = 6x_{ref}$  fiziksel olarak makul bir şart olarak kabul edilebilmektedir ve bu koşul mevcut çalışmadaki analizlerde de kullanılmıştır. Aynı mesafe molekül topaklaşması için de bir koşul olarak tanımlanmıştır. Eğer bir pivot molekülün merkezinde olduğu  $R_{eff} = 6x_{ref}$  yarıçaplı bir kürenin içerisinde pivot molekülün de dahil olduğu en az üç molekül yer alıyorsa bu yapı bir topak olarak kabul edilmiştir.

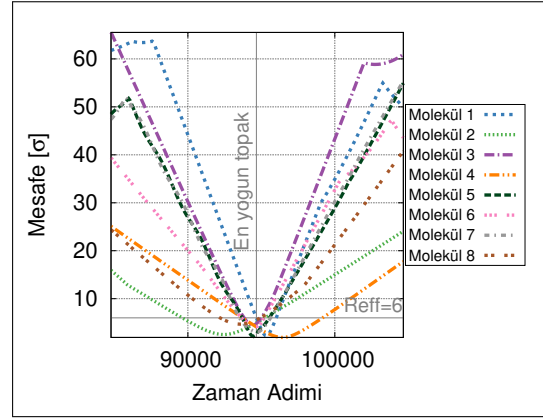
Daha az yoğunlukta molekül içeren çözüm hacmi içerisinde ve  $U_x/U_{ref} = 1,0$  kütleli hızındaki analizde elde edilen en yoğun topak Şekil 4'te çözüm hacmi içerisinde gösterilmiştir. Periyodik sınır koşulunun uygulandığı yüzeylerin kenarları yeşil çizgiler ile görselleştirilmiştir. Bu topak içerisindeki



moleküllerin pivot moleküle olan uzaklıklarının bu topağın gözlemlendiği zaman adımı öncesinde ve sonrasındaki değişimi Şekil 5'te verilmiştir. Görülebileceği üzere bütün moleküller pivot moleküle doğru yaklaşmakta ve bir moleküler topak meydana getirmektedir. Topak gözlemlendikten kısa bir süre sonra da bu moleküller pivot molekülden uzaklaşmaktadır. Bu durum türbülanslı akış içerisindeki bir çevrintinin oluşmasına ve daha sonra sınırlı olan ömrünü tamamlayıp saçılma olayı neticesinde bölünmesine benzetilebilir [Çıray, 2020].



Şekil 4:  $U_x/U_{ref} = 1,0$  kütle hızında ve daha az yoğun çözüm hacmi içerisinde gözlemlenen en yoğun topağın (kırmızı çember içindeki mavi moleküller) çözüm hacmi içerisindeki konumu



Şekil 5:  $U_x/U_{ref} = 1,0$  kütle hızında ve daha az yoğun çözüm hacmi içerisinde gözlemlenen en yoğun topak içerisindeki moleküllerin pivot moleküle uzaklığının zamana bağlı değişimi

Tablo 2'de farklı kütle hızları ve çözüm hacimlerinde simülasyonlardan elde edilen moleküler topaklaşma sonuçları özetlenmiştir. Daha az yoğunlukta molekül içeren çözüm hacmi içerisindeki sonuçların kütle hızı ile arasında kayda değer bir korelasyon gözlemlenmemektedir. En yoğun topaktaki, bir başka deyişle en çok molekülü içeren topağın içerdiği molekül sayısında düzenli bir değişim bulunmamaktadır ve topaklardaki ortalama molekül sayısı kütle hızı değişimine rağmen yaklaşık olarak sabittir. Her ne kadar toplam topak sayısının kütle hızı ile beraber artış eğilimi gösterdiği noktalar yoğunlukta olsa da  $U_x/U_{ref} = 0,6$  ve  $U_x/U_{ref} = 1,0$  sonuçları gibi eğilimi bozan veriler elde edilmiştir.

Daha yüksek yoğunlukta sonuçlara bakıldığında ise her bir zaman adımında gözlenen topak sayısının toplamının kütle hızı ile orantılı olarak arttığı yorumlanabilir. Toplam topak sayısına benzer bir şekilde en yoğun topak içerisindeki molekül sayısının ve topaklardaki ortalama molekül sayısının yüksek kütle hızlarında artabileceği görülmektedir. Bu çözüm hacminden elde edilen sonuçlar Çıray [2020]'in sunduğu gözlemler ile uyumaktadır.

Genel olarak kütle hızı ile topaklaşma sonuçları arasında yüksek hacimli çözüm hacminde bir ilişki gözlemlenemezken, geniş çözüm hacminde bir korelasyon gözlemlenmektedir. Bilindiği üzere akışkan yoğunluğu Reynolds sayısını doğrudan etkilemektedir. Yapılan simülasyonlardaki referans uzunluğun moleküler seviyede olmasından dolayı geniş hacimde yapılan düşük yoğunluklu analizlerde, yüksek hızlarda simülasyon yapılsa da türbülanslı rejime geçilmediği söylenebilir. Yüksek yoğunluklu simülasyonlarda ise düşük kütle hızlarında laminar rejimden türbülanslı rejime geçildiği ve bu sebeple kütle hızının ve buna bağlı olarak Reynolds sayısının  $U_x/U_{ref} = 0,2$  değerinden itibaren topaklaşma sonuçlarını etkilediği söylenebilir. Buna rağmen, yüksek yoğunluklu çözüm hacmi içerisinde ve  $U_x/U_{ref} = 1,0$  kütle hızındaki ortalama molekül sayısında daha düşük kütle hızı ile yapılan analiz sonuçlarına göre bir düşüş görülmektedir. Bunun sebebi olarak MD simülasyonlarının başlangıç koşullarındaki rastgeleliğin analiz sonundaki sonuçlara etkisi verilebilir.

Tablo 2: Farklı kütleli hızlardaki ve çözüm hacimlerindeki MD simülasyonlarının topaklaşma sonuçları

Çözüm hacmi boyutları [ $\sigma \times \sigma \times \sigma$ ]	Kütleli hız [ $U_{ref}$ ]	Topak sayısı (Bin)	En yoğun topaktaki molekül sayısı	Topaklardaki ort. molekül sayısı
<b>93x93x93</b>	0,0	2,126	9	3,33
	0,2	2,518	9	3,33
	0,4	2,701	8	3,32
	0,6	2,532	8	3,33
	1,0	2,695	8	3,33
	2,0	3,637	9	3,33
<b>23,25x23,25x23,25 (64 kat daha yoğun)</b>	0,0	549,7	110	58,56
	0,2	545,5	108	58,62
	0,4	551,8	109	58,66
	0,6	554,5	109	58,84
	1,0	558,8	115	58,73
	2,0	570,3	115	59,07

## SONUÇ

Bu çalışmada, basit moleküller için geliştirilmiş ve MATLAB ile yazılmış bir moleküler dinamik simülasyon kodu, C programlama dili ve CUDA kütüphanesi ile GPU üzerinde paralel çalışmak üzere tekrar yazılarak geliştirilmiştir. Geliştirilen kodun doğruluğu Maxwell-Boltzmann dağılımı kullanılarak gösterilmiştir. Buna ek olarak, farklı kütleli hızlarda simülasyonlar yapılmış ve moleküler topaklaşma olayının türbülanslı akış içerisinde gözlemlenen bir çevrinti gibi oluştuğu ve daha sonrasında bölündüğü ortaya konmuştur. Farklı kütleli hızlarda yapılan analizler moleküler topaklaşmanın kütleli hız ve çözüm hacmi içerisindeki yoğunluk ile arasındaki ilişkiyi önermektedir. Geniş çözüm hacminde yapılan analizlerde bir ilişki elde edilememesine rağmen daha dar hacimdeki sonuçlarda kütleli hız ile topaklaşma sonuçları arasında bir korelasyon gözlemlenmiş ve kütleli hızın türbülans ile olan ilişkisi moleküler ölçekte ortaya konmuştur. Farklı çözüm hacimlerinden elde edilen topaklaşma sonuçlarının arasındaki farklılığın sebebi olarak akış yoğunluğunun Reynolds sayısına ve laminar-türbülans geçişine olan etkisi verilmiştir. Gelecekteki çalışmalarda kütleli hız ile moleküler topaklaşma arasındaki ilişki farklı parametreler ve sınır koşulları ile çok sayıda simülasyon ile incelenecektir. Buna ek olarak topaklaşma içerisindeki moleküllerin dönme hızı ve moleküler topakların kütleli hız yönündeki hareketleri incelenerek moleküler topakların türbülanslı akış ile ilişkisi daha ayrıntılı bir şekilde araştırılacaktır.

## TEŞEKKÜR

Bu çalışma kapsamında gerçekleştirilen simülasyonların tamamı TÜBİTAK ULAKBİM Yüksek Başarımlı ve Grid Hesaplama Merkezi (TRUBA) altyapısında yapılmıştır.

## Kaynaklar

Asano, Y., Watanabe, H. ve Noguchi, H., 2020. *Effects of cavitation on Kármán vortex behind circular-cylinder arrays: A molecular dynamics study*, J. Chem. Phys., 152(3), s.034501

Çiray, C., 2015. *A formulation for the activity of simple molecules (Part I)*, 8th Ankara International Aerospace Conference, Ankara, 10-12 Eylül

- Çıray, C., 2020. *Türbülansın bir problemi ve "Türbülansın Kuantik Davranışı" yaklaşımı ile çözümü*, 8. Ulusal Havacılık ve Uzay Konferansı, Ankara, 9-11 Eylül
- Dzwinel, W., Alda, W., Pogoda, M. ve Yuen, D. A., 2000. *Turbulent mixing in the microscale: a 2D molecular dynamics simulation*, Physica D, 137(1-2), s.157-171
- Eneren, Ş.P., 2016. *Validation of a particle simulation approach*, Orta Doğu Teknik Üniversitesi Yüksek Lisans Tezi
- Eneren, Ş.P. ve Çıray, C., 2015. *A formulation for the activity of simple molecules (Part II)*, 8th Ankara International Aerospace Conference, Ankara, 10-12 Eylül
- Gallis, M. A., Bitter, N. P., Koehler, T. P., Torczynski, J. R., Plimpton, S. J. ve Papadakis, G., 2017. *Molecular-Level Simulations of Turbulence and Its Decay*, Phys. Rev. Lett., 118(6), s.064501
- Jones, J. E., 1924. *On the determination of molecular fields. —II. From the equation of state of a gas*, Proc. R. Soc. Lond. A, 106(738), s.463-477
- Kabakçı, İ., 2019. *Applications of a particle simulation approach*, Orta Doğu Teknik Üniversitesi Yüksek Lisans Tezi
- Kabakçı, İ., Çıray, C. ve Çöker, D., 2019. *A thermal equilibrium analysis from particle activity perspective using molecular dynamics simulation*, 10th Ankara International Aerospace Conference, Ankara, 18-20 Eylül
- Koplik, J., Banavar, J. R. ve Willemsen, J. F., 1989. *Molecular dynamics of fluid flow at solid surfaces*, Phys. Fluids. A: Fluid Dyn., 1(5), s.781-794
- Raghavan, B. V. ve Ostoja-Starzewski, M., 2019. *On the Hydrodynamic Stability of a Lennard-Jones Molecular Fluid*, J. Stat. Phys., 177(1), s.61-77
- Rapaport, D. C. ve Clementi, E., 1986. *Eddy Formation in Obstructed Fluid Flow: A Molecular-Dynamics Study*, Phys. Rev. Lett., 57(6), s.695-698