Параллельный алгоритм для численного исследования дозвуковых реагирующих течений в цилиндрической системе координат

М.С. Мустайкин, Е.Е. Пескова

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Статья посвящена разработке параллельного вычислительного алгоритма на основе технологии MPI для численного исследования дозвуковых газовых потоков в трубчатом реакторе. Математическая модель исследуемого процесса представляет собой уравнения газовой динамики в цилиндрической системе координат. Вычислительный алгоритм построен с учетом дозвукового характера течения. Разработанная программа показала рост ускорения и эффективности с увеличением количества расчетных ячеек.

Ключевые слова: математическое моделирование, дозвуковые течения, уравнения газовой динамики, технология MPI.

1. Введение

В настоящее время математическое моделирование является одним из основных методов исследования химически активных сред, наблюдение которых зачастую недоступно в лабораторных экспериментах. В связи с активным развитием вычислительных систем открывается возможность использовать в расчетах более сложные математические модели и большие сетки для получения результатов, наиболее приближенных к реальным течениям газа в химических реакторах.

Задачей, стоящей перед авторами статьи, является создание вычислительного алгоритма и программы для исследования дозвуковых химически активных газопылевых сред в присутствии лазерного излучения, поглощаемого газом и каталитическими наночастицами, в цилиндрической системе координат. Выбор системы координат обоснован необходимостью исследования газопылевых течений в круглых трубах. Трехмерная геометрия необходима для отражения вихревых процессов, наблюдаемых в исследуемых течениях, реализации различных углов ввода газовой смеси в трубу, несимметричного ввода лазерного излучения, что зачастую является необходимым условием интенсификации химических процессов.

В работах [1,2] представлена математическая модель и разработан вычислительный алгоритм для исследования двухфазных газопылевых потоков с химическими реакциями и лазерным излучением для случая осесимметричных течений. Исходная математическая модель требует специализированного подхода при построении вычислительного алгоритма. Для обхода вычислительной сложности, возникающей при расчете изменений характеристик дозвуковых реагирующих сред, в алгоритме использован принцип расщепления по физическим процессам, ориентированный на выделение блоков для расчета каждого физического процесса с подбором адекватного численного метода. Сочетание быстрых химических реакций и медленных газовых потоков обуславливает необходимость выделения решения уравнений химической кинетики в отдельный блок. Отдельные трудности вызывает учет малых изменений давления в потоке. В условиях малых чисел Маха эти изменения незначительны, однако, они являются причиной изменения вектора скорости. В математической модели давление представлено в виде суммы давления, постоянного в области, и динамической поправке к давлению, которое меняется в каждой точке пространства на каждом шаге по времени. Также требует необходимости разработка отдельных блоков для учета лазерного излучения и характеристик каталитических наночастиц.

Целью настоящей работы является построение параллельного вычислительного алго-

ритма для уравнений газовой динамики в цилиндрической системе координат, поскольку уже на этапе учета только конвективных потоков и многокомпонентности смеси встала необходимость использования технологий параллельных вычислений.

2. Математическая модель и вычислительный алгоритм

Рассмотрим систему уравнений газовой динамики в цилиндрической системе координат. Данная система получена из уравнений Навье—Стокса в приближении малых чисел Маха с помощью отбрасывания диссипативных членов [3,4].

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F^{(1)}(U)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rF^{(2)}(U))}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial F^{(3)}(U)}{\partial \phi} = Q.$$
(1)

Здесь

$$U = \begin{pmatrix} \rho Y_m \\ \rho u_z \\ \rho u_r \\ \rho u_\phi \\ \rho h \end{pmatrix}, \quad F^{(1)}(U) = \begin{pmatrix} \rho u_z Y_m \\ \rho u_z^2 + \pi \\ \rho u_z u_r \\ \rho u_z u_\phi \\ \rho h u_z \end{pmatrix}, \quad F^{(2)}(U) = \begin{pmatrix} \rho u_r Y_m \\ \rho u_z u_r \\ \rho u_z u_r \\ \rho u_r u_\phi \\ \rho h u_r \end{pmatrix},$$

$$F^{(3)}(U) = \begin{pmatrix} \rho u_{\phi} Y_m \\ \rho u_z u_{\phi} \\ \rho u_r u_{\phi} \\ \rho u_{\phi}^2 + \pi \\ \rho h u_{\phi} \end{pmatrix}, Q = \begin{pmatrix} R_m \\ 0 \\ (\rho u_{\phi}^2)/r \\ (-\rho u_r u_{\phi})/r \\ 0 \end{pmatrix}$$

Здесь ρ – плотность газа, Y_m – массовая доля компоненты газа, $m = \overline{1, M}$ – номер компоненты газа, M – количество компонент в газовой смеси, R_m – скорость образования или расхода m-ой компоненты смеси, u_z , u_r , u_{ϕ} – компоненты вектора скорости, $\pi = p - p_0 -$ динамическое отклонение давления, p – давление, p_0 – давление, постоянное в области, R_m – скорость образования или расхода каждой компоненты смеси для случая наличия химических реакций.

Энтальпию газовой смеси можно определить из температуры смеси T и массовых долей ее компонент:

$$h(T, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T), \quad h_m(T) = \int_{T_{ref}}^T C_{pm}(T) \ dT + h_m^0.$$
(2)

Здесь $T_{ref} = 293.15 \ K, h_m^0$ – энтальпия образования каждой компоненты газа, $C_{pm}(T) = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3$ – удельная теплоемкость каждой компоненты смеси при постоянном давлении, заданная многочленом, аппроксимирующим известные термодинамические табличные данные в нужном интервале температур [5].

Для построения дискретной модели введём равномерную по каждому направлению сетку:

$$\Omega_h = \left\{ z_i = ih_z, r_j = jh_r, \phi_k = kh_\phi; i = \overline{1, N_z}, j = \overline{1, N_r}, k = \overline{1, N_\phi}; N_z h_z = L_z, N_r h_r = L_r, N_\phi h_\phi = L_\phi \right\}$$

При построении вычислительного алгоритма используем схему расщепления по физическим процессам:

1. На первом шаге решается система уравнений химической кинетики:

$$\begin{pmatrix}
\frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} = R_1, \\
\frac{\partial \rho Y_2}{\partial t} = R_2, \\
\dots \\
\frac{\partial \rho Y_M}{\partial t} = R_M.
\end{cases}$$
(3)

Для решения данной системы используется подключаемый модуль RADAU5 [6]. В результате находятся промежуточные значения вектора ρY_m , $m = \overline{1, M}$.

2. На втором шаге решается система уравнений (1) без учета вклада динамического отклонения давления и химических реакций:

$$\frac{U_{ijk}^{n+1} - U_{ijk}^{n}}{\Delta t} + \frac{\widetilde{F}_{i+1/2jk}^{(1)} - \widetilde{F}_{i-1/2jk}^{(1)}}{h_{z}} + \frac{r_{ij+1/2k} \cdot \widetilde{F}_{ij+1/2k}^{(2)} - r_{ij-1/2k} \cdot \widetilde{F}_{ij-1/2k}^{(2)}}{r_{ijk} \cdot h_{r}} + \frac{\widetilde{F}_{ijk+1/2}^{(3)} - \widetilde{F}_{ijk-1/2}^{(3)}}{r_{ijk} \cdot h_{\phi}} = Q_{ijk}.$$
 (4)

Здесь $\widetilde{F}_{i+1/2jk}^{(1)}, \widetilde{F}_{ij+1/2k}^{(2)}, \widetilde{F}_{ijk+1/2}^{(3)}$ – дискретные потоки между *i* и *i*+1, *j* и *j*+1, *k* и *k*+1 ячейками соответственно, для расчета которых применяется поток Русанова [7]:

$$\begin{split} \widetilde{F}_{i+1/2jk}^{(1)} &= 0.5 \left(\widetilde{F}^{(1)} \left(U_{i+1/2jk}^+ \right) + \widetilde{F}^{(1)} \left(U_{i+1/2jk}^- \right) - \alpha_1 \left(U_{i+1/2jk}^+ - U_{i+1/2jk}^- \right) \right), \\ \widetilde{F}_{ij+1/2k}^{(2)} &= 0.5 \left(\widetilde{F}^{(2)} \left(U_{ij+1/2k}^+ \right) + \widetilde{F}^{(2)} \left(U_{ij+1/2k}^- \right) - \alpha_2 \left(U_{ij+1/2k}^+ - U_{ij+1/2k}^- \right) \right), \\ \widetilde{F}_{ijk+1/2}^{(3)} &= 0.5 \left(\widetilde{F}^{(2)} \left(U_{ijk+1/2}^+ \right) + \widetilde{F}^{(2)} \left(U_{ijk+1/2}^- \right) - \alpha_3 \left(U_{ijk+1/2}^+ - U_{ijk+1/2}^- \right) \right). \end{split}$$

 $U_{i+1/2jk}^+, U_{i+1/2jk}^-$ значения вектора переменных Uслева и справа от грани между i и i+1ячейками, для которой вычисляется поток $\widetilde{F}_{i+1/2jk}^{(1)}, U_{ij+1/2k}^+, U_{ij+1/2k}^-$ значения вектора переменных Uслева и справа от грани между j и j+1ячейками, для которой вычисляется поток $\widetilde{F}_{ij+1/2k}^{(2)}, U_{ijk+1/2}^+, U_{ijk+1/2}^-$ значения вектора переменных Uслева и справа от грани между j и j+1ячейками, для которой вычисляется между k и k+1ячейками, для которой вычисляется поток $\widetilde{F}_{ijk+1/2}^{(2)}$.

Стабилизирующий член потока находится из выражений [8,9]:

$$\alpha_{1} = \max\left(\sqrt{\left(u_{z,i+1/2jk}^{+}\right)^{2} + \left(u_{r,i+1/2jk}^{+}\right)^{2} + \left(u_{\phi,i+1/2jk}^{+}\right)^{2}}, \sqrt{\left(u_{z,i+1/2jk}^{-}\right)^{2} + \left(u_{\phi,i+1/2jk}^{-}\right)^{2} + \left(u_{\phi,i+1/2jk}^{-}\right)^{2}}\right),$$

$$\alpha_{2} = \max\left(\sqrt{\left(u_{z,ij+1/2k}^{+}\right)^{2} + \left(u_{r,ij+1/2k}^{+}\right)^{2} + \left(u_{\phi,ij+1/2k}^{+}\right)^{2}}, \sqrt{\left(u_{z,ij+1/2k}^{-}\right)^{2} + \left(u_{\phi,ij+1/2k}^{-}\right)^{2} + \left(u_{\phi,ij+1/2k}^{-}\right)^{2}}\right),$$

Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2025) || Parallel computational technologies (PCT'2025) aqora.quru.ru/pavt

$$\alpha_{3} = \max\left(\sqrt{\left(u_{z,ijk+1/2}^{+}\right)^{2} + \left(u_{r,ijk+1/2}^{+}\right)^{2} + \left(u_{\phi,ijk+1/2}^{+}\right)^{2}}, \sqrt{\left(u_{z,ijk+1/2}^{-}\right)^{2} + \left(u_{\phi,ijk+1/2}^{-}\right)^{2} + \left(u_{\phi,ijk+1/2}^{-}\right)^{2}}\right).$$

В результате находятся плотность ρ , концентрации компонент смеси Y_m , энтальпия h, предварительные компоненты вектора скорости u_r^* , u_z^* , u_{ϕ}^* , из решения уравнения (2) методом Ньютона находится температура T.

3. На третьем шаге рассчитывается динамическая поправка к давлению и проводится коррекция вектора скорости.

Для расчета динамической поправки к давлению используется выражение [3]:

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \left(\nabla \cdot \vec{u}^* - \nabla \cdot \vec{u}^{n+1} \right).$$
(5)

Здесь $\vec{u}^{n+1} = \frac{1}{\rho_{\rm g}} \sum_{m} \left(\frac{M_w}{M_{wm}} - \frac{h_m}{C_p T_{\rm g}} \right) R_m$ – выражение для дивергенции вектора скоро-

сти [3], M_w , M_{wm} – молекулярная масса смеси и компоненты соответственно.

Для решения уравнения Пуассона (5) используется метод Якоби:

$$\frac{\pi_{i+1jk} - 2\pi_{ijk} + \pi_{i-1jk}}{h_z^2} + \frac{\pi_{ij+1k} - 2\pi_{ijk} + \pi_{ij-1k}}{h_r^2} + \frac{1}{r_{ijk}^2} \frac{\pi_{ijk+1} - 2\pi_{ijk} + \pi_{ijk-1}}{h_\phi^2} + \tag{6}$$

$$+\frac{1}{r_{ijk}}\frac{\pi_{ij+1k} - \pi_{ij-1k}}{2h_r} = G_{ijk}, \quad G_{ijk} = \frac{\rho^n}{\Delta t} \left(\nabla \cdot \vec{u}^* - \nabla \cdot \vec{u}^{n+1}\right).$$
(7)

После нахождения динамической поправки к давлению корректируем вектор скорости:

$$\vec{u}_z^{n+1} = u_z^* - \frac{\Delta t}{\rho^n} \frac{\partial \pi^{n+1}}{\partial z},\tag{8}$$

$$\vec{u}_r^{n+1} = u_r^* - \frac{\Delta t}{\rho^n} \frac{\partial \pi^{n+1}}{\partial r},\tag{9}$$

$$\vec{u}_{\phi}^{n+1} = u_{\phi}^* - \frac{\Delta t}{\rho^n} \frac{1}{r} \frac{\partial \pi^{n+1}}{\partial \phi}.$$
(10)

(11)

В результате находятся динамическое отклонение от давления π , компоненты вектора скорости u_r , u_z , u_{ϕ} .

3. Параллельная реализация алгоритма

Расчетная область представляет собой цилиндр, покрытый равномерной сеткой с числом ячеек G_Nz, G_Nr, G_Np по соответствующему направлению (рис. 1).

За основу параллельного алгоритма принята трехмерная геометрическая декомпозиция области. Область разбивается на sz_z частей по оси OZ, sz_r частей по оси OR и sz_p по OP с равным количеством ячеек в каждой из образовавшихся подобластей. Каждая подобласть будет обрабатываться параллельно, и решение будет производиться по одинаковой схеме на каждом вычислительном узле. Для сохранения однородности схемы вычисления, по всем границам подобласти вводятся по одному слою фиктивных ячеек. Значения газодинамических параметров в этих дополнительных ячейках определяются либо исходя из граничных условий, если область является приграничной, либо посредством межпроцессорных обменов с соседними областями. Общее количество параллельных процессов равно $sz_z \cdot sz_r \cdot sz_p$.

Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2025) || Parallel computational technologies (PCT'2025) aqora.quru.ru/pavt



Рис. 1. Расчетная сетка

Параллельная программа разработана с использованием технологии для систем с распределенной памятью MPI, реализация механизмов межпроцессорного обмена осуществляется с помощью библиотеки MPICH. При запуске программы в первую очередь определяются соседи процесса по каждой границе и начальные координаты области на каждом параллельном процессе для возможности вычисления координаты любой ячейки. Начальных координат области достаточно, поскольку сетка равномерная по каждому направлению. Координаты ячейки необходимы для определения областей ввода смеси, лазерного излучения и вывода данных в файл. Далее, зная размерность сетки на каждом процессе $Nz \times Nr \times Np$, выделяется память под массивы газодинамических параметров и происходит их заполнение начальными данными. Далее вызывается процедура выполнения одного шага по времени, которая имеет следующую структуру:

- 1. Организации граничных условий в фиктивных ячейках. На исходной границе условия определяются обычным способом (условия втекания, вытекания, прилипания, отражения), в случае внутренней границы фиктивные ячейки заполняются посредством межпроцессорных обменов между соседними областями. Для пересылки данных в программе используются функции MPI Send() и MPI Recv().
- 2. Процедура расчета уравнений химической кинетики.
- 3. Процедура расчета уравнений газовой динамики.
- Процедура решения уравнения Пуассона для динамической поправки к давлению. Поскольку используется метод Якоби, который требует небольшого количества итераций, внутри этой процедуры происходит межпроцессорный обмен до сходимости метода.

Вывод результатов производится каждым процессом в файлы с расширением *.vts, для визуализации используется программа ParaView.

4. Тестовый расчет

Параллельная версия предложенного алгоритма была реализована программно на языке C++. Для получения информации о производительности были выполнены расчеты для следующей задачи. Рассматривалась цилиндрическая труба диаметром 0.02 м и длиной 0.256 м. В начальный момент времени труба заполнена покоящимся метаном. Температура в области 600°C, давление 101325 Па. Слева в трубу поступает тоже метан, но с температурой 700°C и расходом 60 л/ч. На выходе из трубы справа задано условие вытекания, давление 101325 Па. Перепад давления на входе и выходе трубы задан 10^{-2} Па.

Поскольку нашей задачей является разработка основы параллельного алгоритма для дозвуковых двухфазных реагирующих течений и программа в дальнейшем будет расши-

ряться, температуры в начальных условиях приняты такие, что химические реакции разложения метана отсутствуют, смесь считается однокомпонентной. На рис. 2–3 представлены распределения плотности и температуры смеси, которые соответствуют физике процесса: с увеличением температуры в области посредством втекания горячего газа, плотность в этой области понижается.



Для оценки эффективности параллельного алгоритма измерялось время, затрачиваемое на выполнение определенного числа шагов по времени, с использованием различного количества параллельных процессов и расчетных ячеек. Расчеты проводились на рабочей станции ФГБОУ ВО «МГУ им. Н.П. Orapeва» AMD Ryzen Threadripper 3990X 2900 МГц, 64 ядра.



Рис. 4. Ускорение

Рис. 5. Эффективность

При небольшом количестве параллельных процессов наблюдается суперлинейное ускорение и эффективность оказывается выше 100%. Однако, с увеличением количества процессов до 64 эффективность падает. Это связано с тем, что при увеличении количества декомпозиционных подобластей увеличивается и время, затраченное на межпроцессорные обмены. Из графиков видно, что с увеличением размерности расчетной сетки ускорение постепенно приближается к количеству вычислительных узлов и эффективность растет. Ожидается, что в случае включения громоздких схем химических реакций, которые будут независимо просчитываться на каждом процессе, эффективность на большом количестве процессов будет расти.

5. Заключение

Разработан параллельный вычислительный алгоритм с использованием технологии MPI для решения уравнений газовой динамики в цилиндрической системе координат с блочной структурой. Для разработанного параллельного алгоритма исследованы эффективность и ускорение для различного числа используемых процессоров. Сделаны выводы, что результирующий алгоритм позволит проводить серийные расчеты для различных углов ввода газовой смеси, а его блочная структура позволит расширить модель на учет различных эф-

фектов, возникающих в задачах моделирования химически активных двухфазных течений с лазерным излучением.

Литература

- Snytnikov V.N., Peskova E.E., Stoyanovskaya O.P. Mathematical Model of a Two-Temperature Medium of Gas-Solid Nanoparticles with Laser Methane Pyrolysis // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. Vol. 15. P. 877–893. DOI: 10.1134/S2070048223050095.
- Пескова Е.Е., Снытников В.Н., Жалнин Р.В. Вычислительный алгоритм для изучения внутренних ламинарных потоков многокомпонентного газа с разномасштабными химическими процессами // Компьютерные исследования и моделирование. 2023. Т. 15, № 5. С. 1169–1187. DOI: 10.20537/2076-7633-2023-15-5-1169-1187.
- Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // Combustion Theory and Modelling. 2000. Vol. 4, no. 4. P. 535–556. DOI: 10.1088/1364-7830/4/4/309.
- Борисов В.Е., Якуш С.Е. Применение адаптивных иерархических сеток для расчета течений реагирующих газов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2015. Т. 16, № 2. С. 1–13.
- Stadnichenko O.A., Snytnikov V.N., Snytnikov Vl.N., Masyuk N.S. Mathematical modeling of ethane pyrolysis in a flow reactor with allowance for laser radiation effects // Chemical Engineering Research and Design. 2016. Vol. 109, P. 405–413. DOI: 10.1016/j.cherd.2016.02.008.
- 6. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- 7. Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1961. Т. 1, № 2. С. 267–279.
- Klein B., Muller B., Kummer F., Oberlack M. A high-order discontinuous Galerkin solver for low Mach number flows // International Journal for Numerical Methods in Fluids. 2015. Vol. 81, no. 8. P. 489–520. DOI: 10.1002/fld.4193.
- 9. Peskova E.E. Mathematical Modeling of Nonstationary Problems Related to Laser Thermochemistry of Methane in the Presence of Catalytic Nanoparticles // Doklady Mathematics. 2024. Vol. 109, no. 3. P. 256–261. DOI: 10.1134/S1064562424702107.