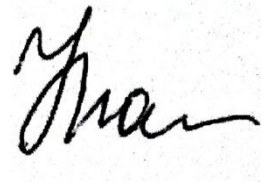


На правах рукописи



Носова Татьяна Александровна

**Вычислительные модели фильтрационного
горения газа в режиме низких скоростей**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск – 2018

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук (ИВМиМГ СО РАН)

Научный руководитель: Лаевский Юрий Миронович,
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Чумакова Наталия Алексеевна,
кандидат технических наук. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, старший научный сотрудник.

Меньшов Игорь Станиславович,
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник. Федеральное государственное учреждение "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук", ведущий научный сотрудник.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук

Защита диссертации состоится 25 декабря 2018 года в 15 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 003.061.02, созданного на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, по адресу: 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 6, конференц-зал ИВМиМГ СО РАН, тел. +7 (383) 330-71-59, www.icmmg.nsc.ru

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на официальном сайте ИВМиМГ СО РАН: www.icmmg.nsc.ru

Автореферат разослан 24 октября 2018 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета,
д.ф.-м.н.



Сорокин Сергей Борисович

Общая характеристика работы

Работа посвящена моделированию и численному исследованию процесса фильтрационного горения газа (ФГГ).

Актуальность работы. ФГГ представляет собой явление, весьма богатое с точки зрения определяющих его физических механизмов.

ФГГ имеет множество практических приложений в таких областях как химические технологии (процессы, протекающие в каталитических реакторах при выработке определенных химических веществ), пожаро-взрывобезопасность (конструирование промышленных огнепреградителей), энергосберегающие технологии (разработка экономичных с точки зрения энергозатрат технологий термической обработки материалов), экология (разработка и оптимизация работы экологически чистых пористых горелок), нефтедобыча (технологии, основанные на внутрислоевом горении). Внедрение и усовершенствование технологий, основанных на использовании свойств ФГГ, требуют глубокого понимания характеристик, присущих процессу, а так же возможности предсказывать его «поведение» при тех или иных условиях.

Наряду с экспериментальными исследованиями любого физического процесса важную роль играет возможность изучать процесс численно. В задачах горения построение математической модели и соответствующего вычислительного алгоритма требует особенной аккуратности ввиду сложности физико-химического явления и огромной разномасштабности диффузионно-конвективного и кинетического процессов, взаимодействие которых формирует такую макрохарактеристику, как скорость фронта горения. При этом наличие адекватных математических моделей и грамотная реализация вычислительных алгоритмов позволяют избежать лишних затрат на (порой дорогостоящее) экспериментальное оборудование и многочисленные опыты.

В то же время стремительно развивающаяся вычислительная техника, появление кластеров и технологий параллельного вычисления открывают перед исследователями новые возможности в области численного моделирования. При этом библиография работ с численными реализациями математических моделей ФГГ достаточно бедна. Большинство известных публикаций содержат результаты расчетов различных прикладных задач, включающих процессы ФГГ. Зачастую из таких работ невозможно сделать вывод об используемых методах или о количественных характеристиках процесса.

Целью работы является разработка эффективных вычислительных алгоритмов для численного моделирования процесса фильтрационного горения газа в режиме низких скоростей и их параллельная реализация на современных суперЭВМ. Для достижения этой цели были поставлены и решены **следующие задачи**:

- 1) Построение вычислительных алгоритмов для численного решения задач ФГГ;
- 2) Адаптация построенных алгоритмов для параллельного выполнения на многопроцессорных вычислительных машинах (кластерах);
- 3) Создание комплекса программ для численного моделирования процессов ФГГ;

Методы исследований. В диссертации используются методы вычислительной математики и математического моделирования. В частности, в основе построения многомерных вычислительных моделей лежит смешанный метод конечных элементов. Разработка программного обеспечения проводилась на языке С, с использованием технологий OpenMP и MPI.

Научная новизна и практическая значимость представленных в диссертации результатов состоит как в впервые введенных и использованных отдельных элементах математических моделей ФГГ, так и в разработке новых вычислительных алгоритмов в целом. Так, ранее в литературе по теории горения отсутствовало понятие «поток полной энтальпии», которое позволяет сформулировать вычислительные алгоритмы, обеспечивающие точное выполнение сеточного закона сохранения энергии. Далее, в диссертации определено понятие «мгновенная скорость фронта горения», как функции скорости от равновесной температуры, являющейся известным балансным соотношением при стационарном распространении волны ФГГ. Использование этой функции в нестационарных задачах впервые позволило получить устойчивый алгоритм вычисления скорости фронта. И, наконец, впервые в научной литературе рассмотрен вопрос о построении вычислительных моделей ФГГ с точки зрения их реализации на кластерах с использованием средств MPI и OpenMP.

Представленные в диссертации исследования проводились в рамках проектов, поддержанных грантами РФФИ (№№ 12–01–31046, 13–01–00019, 16–29–15122 офи-м) и РНФ (№ 15–11–10024).

Основные положения, выносимые на защиту:

- Новые одномерные и многомерные вычислительные модели ФГГ в режиме низких скоростей.

- Основанные на явных и неявных схемах вычислительные алгоритмы реализации математических моделей ФГГ.
- Устойчивый алгоритм одновременного вычисления равновесной температуры и скорости фронта горения.
- Комплекс программ для современных многопроцессорных систем и проведение на его основе численных экспериментов с целью анализа, как эффективности самих алгоритмов, так и адекватности предлагаемых моделей известным представлениям о процессе ФГГ.

Достоверность результатов исследования подтверждается согласованностью с теоретическими и экспериментальными данными о процессе, представленными в литературе.

Апробация. Основные результаты, приведенные в данной диссертации, были опубликованы в 6-ти научных статьях: 4 из которых ([2], [3], [5], [6]) – в рейтинговых международных изданиях, и 2 ([1], [4]) – в журналах, индексируемых аналитической базой данных РИНЦ, а так же были представлены на конференциях и семинарах различного уровня, таких как: Конференция молодых ученых ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 3 – 5 апреля 2013 г; 11th International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Waves, WAVES-2013, Gammarth, Tunisia, 3 – 7 июня 2013 г; Middle-European Conference on Applied Theoretical Computer Science (MATCOS 2013), Koper, Slovenia, 10 – 11 октября 2013 г; Седьмая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям, Томск, 12 – 14 ноября 2013 г; Национальный Суперкомпьютерный Форум (НСКФ-2013), Переславль-Залесский, 26 – 29 ноября 2013 г; Second Russian – French Workshop “Computational Geophysics”, Berdsk, 22 – 25 сентября 2014 г; Конференция молодых ученых ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 6 – 8 апреля 2015 г; Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2015» (АПВПМ-2015), посвященной 90-летию со дня рождения академика Гурия Ивановича Марчука, Академгородок, Новосибирск, 19 – 23 октября 2015 г; Конференция молодых ученых ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 11 – 13 апреля 2016 г; Russian-British Workshop on "Uncertainty Quantification in Inverse Modelling", Новосибирск, 25 – 27 апреля 2016 г; III Международная конференция "Суперкомпьютерные технологии математического моделирования" (СКТеММ-2016), Москва, 27 июня – 1 июля 2016 г; International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2017), Thessaloniki, Greece, 21 – 25 апреля 2017 г; Международная конференция по вычислительной и прикладной математике (ВПМ'17), Новосибирск, 25 – 30 июня 2017 г; The Fifth Russian-Chinese

Workshop on Numerical Mathematics and Scientific Computing, Новосибирск, 29 – 30 июня 2017 г.

Личный вклад соискателя заключается в обсуждении математических моделей и участии в постановках задач, в построении численных алгоритмов, разработке и тестировании комплекса программ, проведении численных экспериментов, участии в интерпретации и анализе полученных результатов.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа изложена на **102** страницах и состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы, содержащего **106** наименований. Предваряет изложение список обозначений для используемых в тексте физико-химических параметров, с расшифровкой их физического смысла и размерности в системе Си. Изложение результатов диссертации сопровождается **18** таблицами и **33** рисунками.

Содержание работы

Введение содержит общую характеристику диссертации, обзор литературы по теме исследования, а также краткое содержание работы по главам.

В **главе 1** рассматриваются одномерные вычислительные алгоритмы, основанные на математической модели в энтальпийной постановке.

В **пункте 1.1** описан переход от классической постановки, включающей в себя уравнение для температуры газа, к энтальпийной постановке. Классическая одномерная двухтемпературная математическая модель ФГГ включает уравнение переноса тепла по каркасу и уравнения переноса тепла и массы реагирующего компонента газовой смеси:

$$c_s \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \lambda_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} + \frac{\alpha}{1-m} (T_g - T_s), \quad (1)$$

$$c_g \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = \lambda_g \frac{\partial^2 T_g}{\partial x^2} - c_g \rho_g v \frac{\partial T_g}{\partial x} + \frac{\alpha}{m} (T_s - T_g) + Q \rho_g W(\eta, T_g), \quad (2)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} - v \frac{\partial \eta}{\partial x} - W(\eta, T_g). \quad (3)$$

Здесь T_i , ρ_i , c_i , λ_i – температура, плотность, удельная теплоемкость при постоянном давлении и коэффициент теплопроводности i -й фазы ($i = s$ – пористая среда, $i = g$ – газ) соответственно, η – относительная концентрация реагирующего компонента горючей смеси; m – пористость (отношение всего объема к суммарному объему порового пространства); α – интенсивность межфазного теплообмена; v – скорость подачи горючей смеси; Q – тепловой эффект реакции; D – коэффициент диффузии газа.

Скорость химической реакции определяется законом Аррениуса с суммарной кинетикой первого порядка: $W(\eta, T_g) = k_0 \eta e^{-E/RT_g}$, где k_0 – предэкспонент; E – энергия активации; R – универсальная газовая постоянная. Тот факт, что функция скорости реакции входит в уравнения температуры и диффузии газа с разными знаками, приводит к значительным трудностям при попытке согласованной аппроксимации этих слагаемых, поскольку возникают противоречивые требования устойчивости. Указанную трудность можно преодолеть, используя вместо температуры газа функцию $H = T_g + \frac{Q}{c_g} \eta$, которую назовем относительной газовой энтальпией, и переписав систему (1)-(3) в виде:

$$c_s \rho_s \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_s \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\alpha}{1-m} \left(H - T - \frac{Q}{c_g} \eta \right), \quad (4)$$

$$c_g \rho_g \frac{\partial H}{\partial t} = \lambda_g \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} - c_g \rho_g v \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\alpha}{m} \left(T - H + \frac{Q}{c_g} \eta \right), \quad (5)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} - v \frac{\partial \eta}{\partial x} - \tilde{W}(\eta, H), \quad (6)$$

где

$$\tilde{W}(\eta, H) = W \left(\eta, H - \frac{Q}{c_g} \eta \right).$$

Здесь и далее индекс s у температуры каркаса будем опускать и для функции скорости реакции, как функции переменных η и H , будем использовать исходное обозначение $W(\eta, H)$. Для полученной системы задаются некоторые начальные данные и краевые условия.

Пункт 1.2 посвящен применению явной разностной схемы с использованием равномерной пространственно-временной сетки. Производительность такого алгоритма чрезвычайно низка, т.к. разномасштабность диффузионного и кинетического процессов влечет значительную разницу характерных размеров зон прогрева и реакции, что при использовании равномерной пространственно-временной сетки приводит к необходимости выбора одинаково мелких шагов на всем промежутке. Кроме того, в зоне тепловой релаксации определяющим фактором низкой производительности является условие устойчивости явной разностной схемы. Таким образом, одним из способов повышения производительности явных схем является использование адаптивной пространственно-временной сетки в рамках двухуровневой схемы, главным свойством которой является пространственная локализация условий устойчивости.

В пункте 1.3 подробно описан алгоритм на основе подобной адаптивной сетки, основная суть которого заключается в использовании мелких шагов по пространству (h_f) и по времени (τ_f) в окрестности фронта горения и крупных (h_c и τ_c) – на всем остальном промежутке.

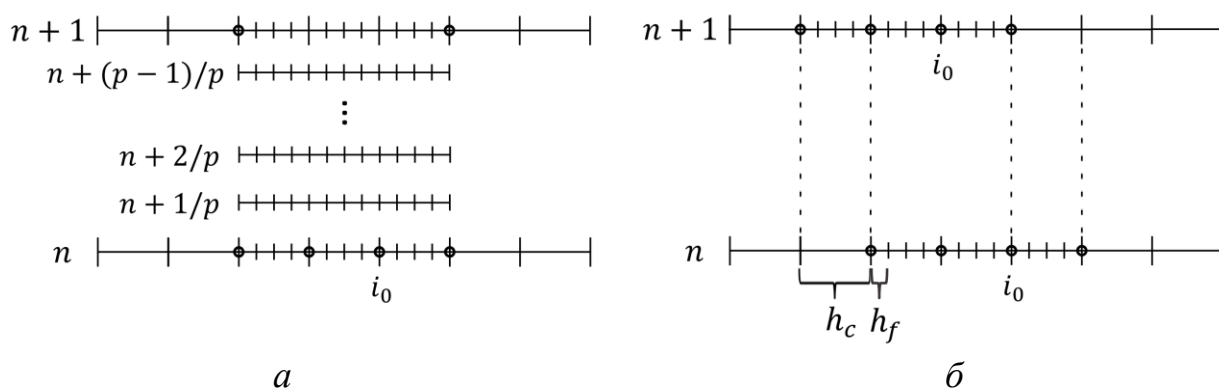


Рис. 1. а) переход с грубой сетки на детальную; б) движение детальной сетки

Процесс перестройки сетки схематически изображен на рисунке 1, где i_0 обозначает некоторый узел грубой сетки, характеризующий положение фронта.

В пункте 1.4 обсуждается возможность применения метода расщепления по физическим процессам. Рассмотрены различные варианты вычислительных алгоритмов, общей идеей которых является использование явной схемы с мелким шагом по времени для вычисления химической реакции и неявной схемы – для вычисления значений температуры каркаса и газовой энтальпии. В таблице 1 приводится сравнение рабочих времен t_{comp} всех описанных в главе 1 алгоритмов. При этом сеточные параметры выбираются в соответствии с некоторым общим для всех условием точности, а так же условием устойчивости для явных схем. Величина шага по времени в неявной схеме метода расщепления $\Delta t = \tilde{N} \cdot \tau$, где τ – шаг явной схемы. Физическое время в данном эксперименте задано $t = 0.1$ с.

Таблица 1.

алгоритм	t_{comp} (с)
Равномерная сетка	63.8
Вложенная сетка	20.2
Метод расщепления ($\tilde{N} = 1024$)	44.5

Нетрудно видеть, что в случае последовательного выполнения вложенная сетка (п. 1.3) дает заметный выигрыш во времени. Однако, как показано в главе 3, параллельная реализация таких алгоритмов не всегда оказывается эффективной и требует особого подхода.

В главе 2 представлена математическая модель ФГГ, основанная на системе уравнений первого порядка в терминах «температура каркаса – тепловой поток в каркасе», «полная газовая энтальпия – поток энтальпии», «масса недостающего компонента горючей смеси – диффузионный поток». Фактически используется так называемая смешанная формулировка с последующей аппроксимацией смешанным методом конечных элементов. Такой подход позволяет обеспечить точное выполнение сеточных законов сохранения.

Пункт 2.1 посвящен одномерной постановке. Вводятся функции:

$$w_T = -\frac{\partial T}{\partial x}, \quad w_H = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad w_\eta = -\frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (7)$$

и система (4)–(6) представляется в виде:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + a_s \frac{\partial w_T}{\partial x} + \alpha_s \left(T - H + \frac{Q}{c_g} \eta \right) = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} + a_g \frac{\partial w_H}{\partial x} - v w_H + \alpha_g \left(H - T - \frac{Q}{c_g} \eta \right) = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + D \frac{\partial w_\eta}{\partial x} - v w_\eta + W(\eta, H) = 0. \quad (10)$$

При этом $\lambda_s w_T$ – поток тепла в каркасе, $c_g \lambda_g w_H$ – поток газовой энтальпии, $D w_\eta$ – поток массы недостающего компонента. Далее совершается переход к интегральной по пространственной переменной форме уравнений (7)–(10). Вычислительная схема строится смешанным методом конечных элементов. Аппроксимация по времени осуществляется на основе явных разностных схем. Численно показано, что на грубых сетках решение с использованием потоков ближе к решению на детальной сетке, чем решение, полученное по алгоритму из п. 1.2. Также в ходе численного исследования одномерной модели был воспроизведен эффект пульсационного горения.

В пункте 2.2 обсуждается вычисление скорости распространения фронта горения. Предлагается устойчивый алгоритм, основанный на точном балансе соотношении между скоростью и равновесной температурой каркаса для установившегося распространения волны горения:

$$u = \frac{T_e - T_b}{(1 + \sigma)(T_e - T_b) + \sigma Q/c_g} v, \quad (11)$$

где T_e – равновесная температура, $T_b = T_0 + Q/c_g$ – адиабатическая температура, $\sigma = (1 - m)c_s \rho_s / m c_g \rho_g$. При этом рассмотрены различные способы определения равновесной температуры. Пример графика скорости фронта от времени приведен на рисунке 2.

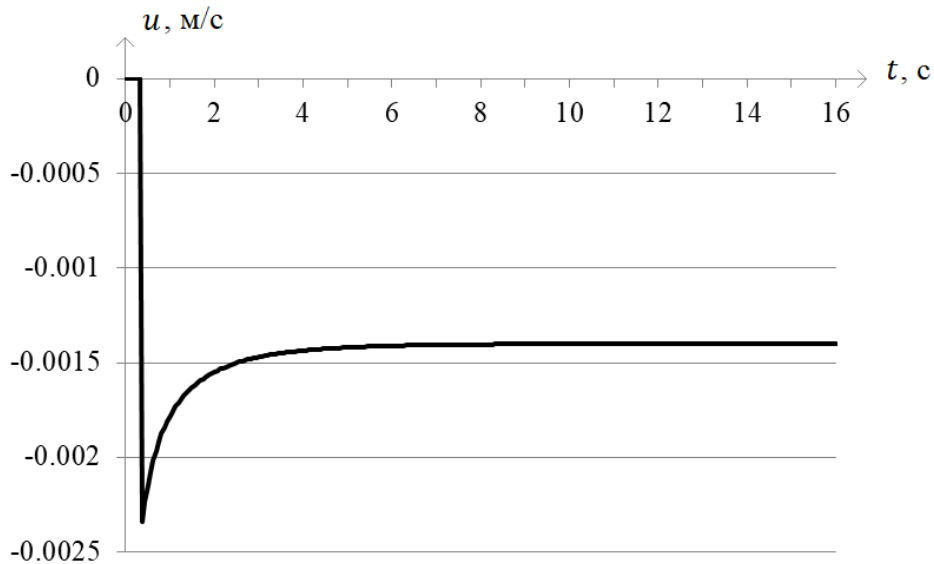


Рис. 2. Мгновенная скорость фронта

Кроме того, было проведено исследование влияния на скорость фронта таких параметров, как скорость подачи газовой смеси и интенсивность межфазного теплообмена. Показано, что при определенных значениях коэффициента теплообмена происходит переход из режима низких скоростей в режим высоких скоростей.

Пункт 2.3 посвящен многомерной постановке. В многомерном случае система уравнений выглядит следующим образом:

$$\mathbf{w}_T = -\nabla T, \quad \mathbf{w}_H = -\nabla H, \quad \mathbf{w}_\eta = -\nabla \eta,$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + a_s \nabla \cdot \mathbf{w}_T + \alpha_s \left(T - H + \frac{Q}{c_{p,g}} \eta \right) = 0,$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} + a_g \nabla \cdot \mathbf{w}_H - \mathbf{v} \cdot \mathbf{w}_H + \alpha_g \left(H - T - \frac{Q}{c_{p,g}} \eta \right) = 0,$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + D \nabla \cdot \mathbf{w}_\eta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{w}_\eta + W(\eta, H) = 0.$$

Аппроксимация реализуется смешанным методом конечных элементов с элементами Равьяра–Тома наименьшей степени. После подстановки сеточных скалярных и векторных функций в соответствующие интегральные тождества, получаем следующую векторно-матричную форму системы:

$$\mathbf{A}_T \mathbf{w}_T - \mathbf{B}_T T = T_0 \mathbf{F}_T,$$

$$\mathbf{A} \mathbf{w}_H - \mathbf{B} H = T_b \mathbf{F}, \tag{12}$$

$$\mathbf{A} \mathbf{w}_\eta - \mathbf{B} \eta = \mathbf{F}.$$

$$\begin{aligned}
C \frac{dT}{dt} + a_s (\mathbf{B}_T)^t \mathbf{w}_T + \alpha_s C \left(T - H + \frac{Q}{c_g} \eta \right) &= 0, \\
C \frac{dH}{dt} + a_g \mathbf{B}^t \mathbf{w}_H - v_x G_x w_{H,x} + \alpha_g C \left(H - T - \frac{Q}{c_g} \eta \right) &= 0, \\
C \frac{d\eta}{dt} + D \mathbf{B}^t \mathbf{w}_\eta - v_x G_x w_{\eta,x} + C W(\eta, H) &= 0.
\end{aligned} \tag{13}$$

Для аппроксимации уравнений **Ошибка! Источник ссылки не найден.** по времени используется явно-неявная схема: все слагаемые берутся с явного слоя, кроме функции скорости реакции, которая аппроксимируется следующим образом:

$$W(\eta, H) \sim \eta^{n+1} Z(\eta^n, H^n). \tag{14}$$

векторы \mathbf{w}_T^n , \mathbf{w}_H^n , \mathbf{w}_η^n вычисляются из (12) по известным сеточным функциям T^n , H^n , η^n . Пример решения двумерной задачи приведен на рисунке 3.

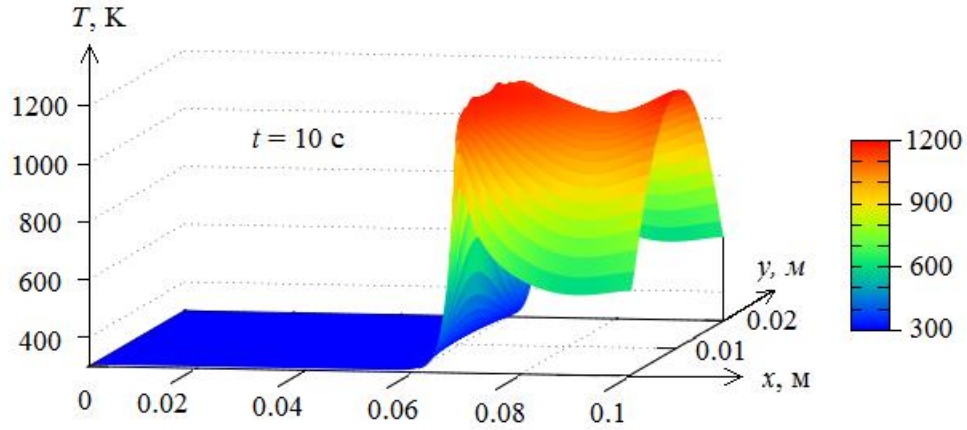


Рис. 3. Температура каркаса в момент времени $t = 10$ с.

В пункте 2.4 описан метод расщепления по пространственным переменным в применении к двумерной задаче ФГГ. Суть метода заключается в разбиении вычислений на 6 шагов:

- 1)
$$\begin{aligned}
C \frac{\eta^{n+1/2} - \eta^n}{\tau} + D (B_y)^t w_{\eta,y}^{n+1/2} &= 0, \\
A_y w_{\eta,y}^{n+1/2} - B_y \eta^{n+1/2} &= F_y.
\end{aligned}$$
- 2)
$$\begin{aligned}
C \frac{\eta^{n+1} - \eta^{n+1/2}}{\tau} + D (B_x)^t w_{\eta,x}^{n+1} - v_x G_x w_{\eta,x}^{n+1} + C \eta^{n+1} Z(\eta^{n+1/2}, H^n) &= 0, \\
A_x w_{\eta,x}^{n+1} - B_x \eta^{n+1} &= F_x.
\end{aligned}$$
- 3)
$$C \frac{T^{n+1/2} - T^n}{\tau} + a_s (B_{T,y})^t w_{T,y}^{n+1/2} = 0,$$

$$A_{T,y}w_{T,y}^{n+1/2} - B_{T,y}T^{n+1/2} = T_0F_{T,y}.$$

$$4) \quad C \frac{H^{n+1/2} - H^n}{\tau} + a_g (B_y)^t w_{H,y}^{n+1/2} = 0,$$

$$A_y w_{H,y}^{n+1/2} - B_y H^{n+1/2} = T_b F_y.$$

$$5) \quad C \frac{H^{n+1} - H^{n+1/2}}{\tau} + a_g (B_x)^t w_{H,x}^{n+1} - v_x G_x w_{H,x}^{n+1} +$$

$$+ \alpha_g C \left(H^{n+1} - T^{n+1/2} - \frac{Q}{c_g} \eta^{n+1} \right) = 0,$$

$$A_x w_{H,x}^{n+1} - B_x H^{n+1} = T_b F_x.$$

$$6) \quad C \frac{T^{n+1} - T^{n+1/2}}{\tau} + a_s (B_x)^t w_{T,x}^{n+1} + \alpha_s C \left(T^{n+1} - H^{n+1} + \frac{Q}{c_g} \eta^{n+1} \right) = 0,$$

$$A_x w_{T,x}^{n+1} - B_x T = T_0 F_x.$$

Каждый из этих шагов выполняется применением метода потоковой прогонки. Главное достоинство рассмотренного подхода заключается в отсутствии ограничений на шаг интегрирования, накладываемых условиями устойчивости явной схемы в зоне химической реакции.

В главе 3 приводится описание реализации алгоритмов из предыдущих глав на многоядерных вычислительных системах. В частности, используются технологии OpenMP и MPI.

В пункте 3.1 рассматриваются два варианта распараллеливания на общей памяти алгоритмов, представленных в главе 1. Первый способ заключается в применении директив OpenMP к внутренним циклам программы, а второй – в распределении данных по потокам. Экспериментально показано преимущество второго подхода над первым.

В пункте 3.2 описывается распараллеливание двумерного алгоритма, описанного в п. 2.3. Для распределения по MPI-процессам рассматриваемая область «разрезается» на вертикальные подобласти вдоль границ ячеек пространственной сетки. На каждом шаге по времени происходит следующее:

1. Каждый MPI-процесс, кроме нулевого, собирает значения искомым функций вдоль левой границы своей подобласти и с помощью функции MPI_Send отправляет их процессу с номером на один меньше.
2. С помощью функции MPI_Irecv каждый процесс, кроме последнего, получает данные, отправленные ему процессом с номером на один больше.

3. Имея необходимые данные, эти процессы вычисляют значения правых частей для дальнейшего нахождения значений потоков в x -направлении.
4. Вычисленные значения правых частей на правой границе своей подобласти каждый процесс (кроме последнего) отправляет процессу с номером на один больше.

После выполнения этих 4х действий каждый из процессов обладает всеми необходимыми ему данными и завершает вычисления на данном временном шаге самостоятельно. При этом перечисленные 4 шага, связанные с обменом данными, выполняются на каждом из процессов единственным выделенным OpenMP-потоком, а все остальные вычисления выполняются в циклах, для которых возможно применение OpenMP-директивы `#pragma omp for`. Численные эксперименты проводились на кластере НКС-30Т ССКЦ. На рисунке 4 представлены результаты распараллеливания, где линия с квадратными маркерами обозначает вычисления на узле G6, содержащем 2 процессора по 4 ядра: Intel® Xeon® Processor E5540, с маркерами-ромбами – на узле G7, содержащем 2 процессора по 6 ядер: Intel® Xeon® Processor X5670. Сетка в данных экспериментах бралась размерности 256×32 . Для узла G6 было использовано по 4 OpenMP-потока на каждом MPI-процессе, а для G7 – по 6 потоков. Суммарно было достигнуто десятикратное ускорение по сравнению с последовательным исполнением алгоритма.

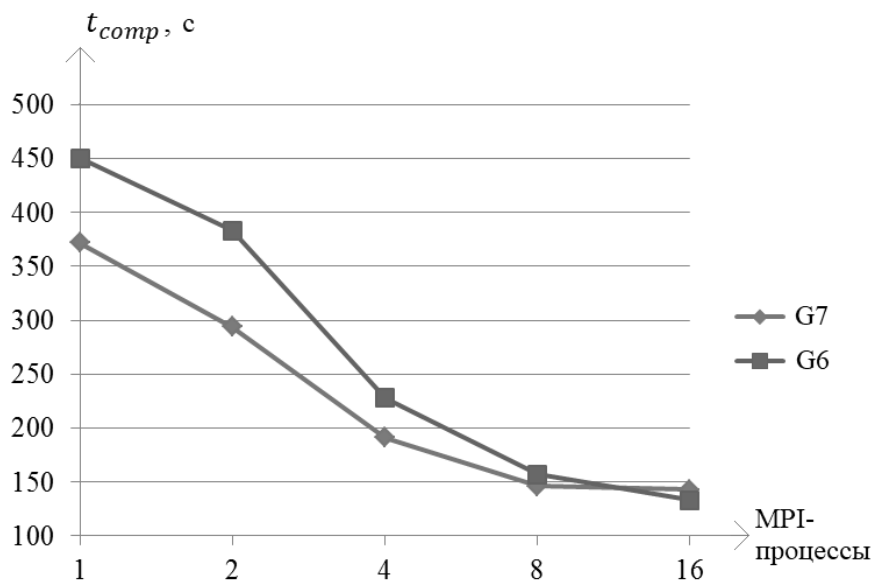


Рис. 4. Распараллеливание с помощью MPI и OpenMP

Пункт 3.3 посвящен распараллеливанию двумерного алгоритма схемы расщепления. Использование технологии MPI для распараллеливания данного алгоритма подразумевает необходимость перераспределения данных по процессам при каждой смене направления счета. Сбор и

перераспределение данных между MPI-процессами были реализованы тремя способами:

1. каждый процесс с помощью функции `MPI_Send` отправляет свои данные некоторому выделенному процессу. Ответственный за сборку процесс получает данные с помощью функции `MPI_Recv`, собирает их в общий массив, переупорядочивает и отправляет каждому процессу новый блок данных (также с помощью `MPI_Send`);
2. сбор данных на выделенном процессе осуществляется функцией коллективного взаимодействия `MPI_Gather`, а распределение – функцией `MPI_Scatter`. Обработка данных производится одним процессом;
3. обмен данными осуществляется с помощью функции `MPI_Alltoall`, переупорядочивание производится на каждом процессе независимо от других.

На рисунке 5 приведены результаты счета на узле G7 на сетке $2^{13} \times 64$.

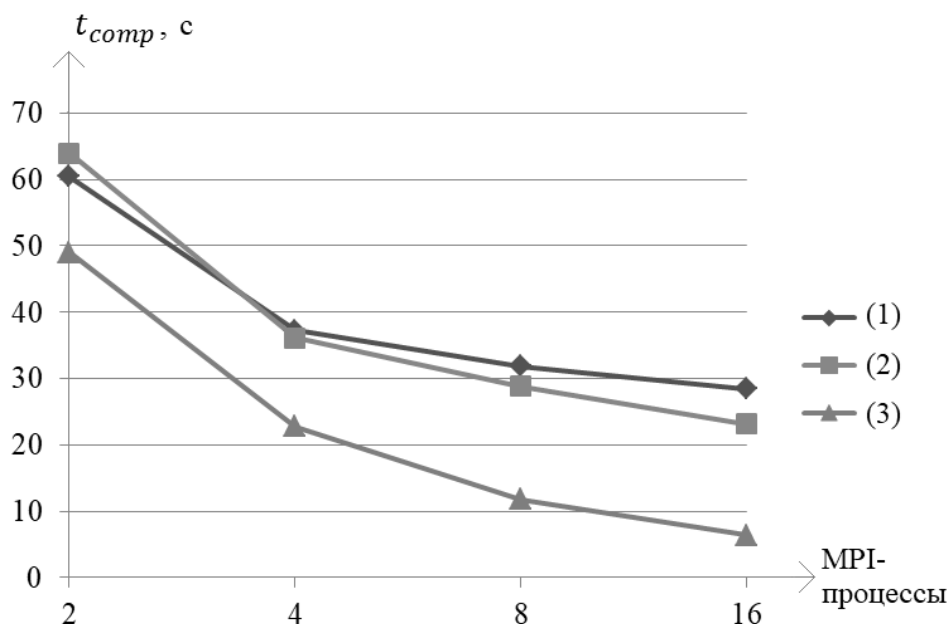


Рис. 5. Сравнительный график различных способов распараллеливания с помощью MPI:
(1) – `Send+Recv`, (2) – `Gather+Scatter`, (3) – `AllToAll`

В **заключении** приводятся основные результаты работы и обсуждаются возможности дальнейшего их применения.

Основные результаты работы

- Предложены различные одномерные и многомерные математические модели ФГГ в режиме низких скоростей.
- На основе явных и неявных схем разработаны вычислительные алгоритмы, использующие равномерные и неравномерные

пространственно-временные сетки. В частности, предложена схема расщепления для решения двумерной задачи.

- Предложен устойчивый алгоритм определения мгновенной скорости распространения фронта горения.
- Разработанные алгоритмы реализованы в виде программ на языке С для последовательного и параллельного исполнения на современных вычислительных системах. Проведен анализ эффективности работы как самих программ, так и лежащих в их основе предложенных вычислительных алгоритмов.
- Проведен ряд численных экспериментов, в результате которых получены и описаны различные закономерности и особенности процесса ФГГ, полностью соответствующие теоретическим и экспериментальным данным. В частности, впервые численно промоделирован пульсационный режим ФГГ.

Список основных публикаций по теме диссертации

1. Кандрюкова Т.А. О численном моделировании процесса фильтрационного горения газа с помощью явных и неявных схем // Труды конференции молодых ученых – 2013. Под редакцией А.С. Родионова. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН. 2014. С. 79–90.
2. Кандрюкова Т.А., Лаевский Ю.М. О численном моделировании фильтрационного горения газов на многоядерных вычислительных системах // Сибирский журнал индустриальной математики. 2014. Т. 17, № 1. С. 55–64.
3. Кандрюкова Т.А., Лаевский Ю.М. О некоторых подходах к моделированию фильтрационного горения газа // Сибирский журнал индустриальной математики. 2015. Т. 18, №4. С. 49–60.
4. Носова Т.А. О некоторых подходах к моделированию фильтрационного горения газа. // Труды конференции молодых ученых. Под редакцией А.С. Родионова. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН. 2016. С. 84–98.
5. Laevsky Yu.M., Nosova T.A. Computational models of filtration gas combustion // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2017. V. 32, Is. 2. P. 115–125.
6. Nosova T.A., Laevsky Yu.M. Numerical simulation of filtration gas combustion // AIP Conference Proceedings. 2017. Vol. 1906, 100003.