

Решение реакционно-диффузионных уравнений в цилиндрической геометрии полуспектральным методом

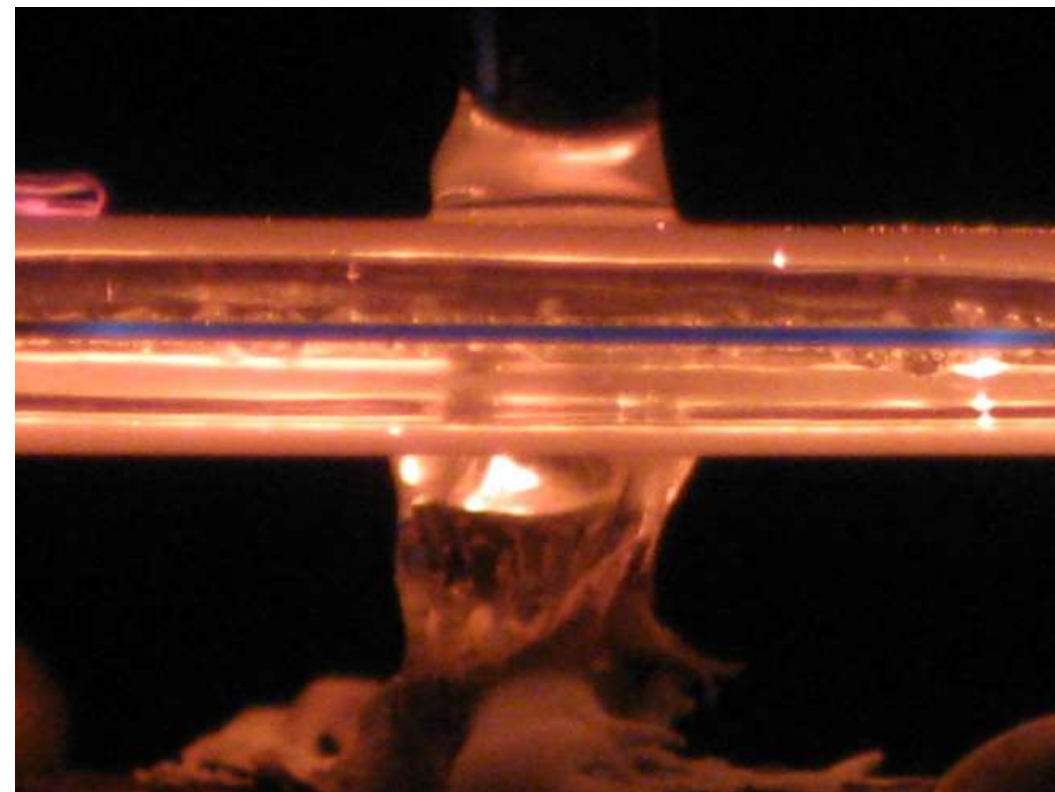
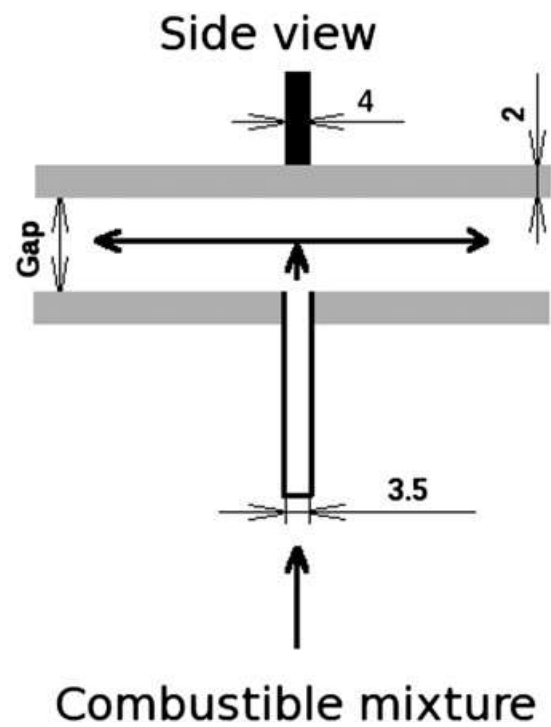
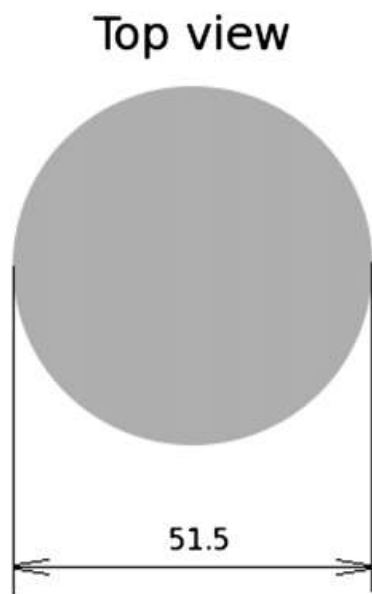
В. В. Замащиков

Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО
РАН, 630090

E. Tikhomolov

TRIUMF, Canada's National Laboratory for Nuclear and Particle Physics,
4004 Wesbrook Mall, Vancouver, BC, V6T 2A3, Canada

Установка



Основные уравнения

$$\partial_0(\rho V_i) + \frac{1}{Pr} \partial_j(\rho V_i V_j) = -\partial_i P + \partial_j(\tau_{ij}) + \frac{1}{Pr Fr^2} \rho n_i \quad (1)$$

$$\partial_0(\rho T) + \frac{\gamma}{Pr} \partial_i(\rho T V_i) = \frac{\gamma Ec}{Pr Fr^2} \rho n_i V_i + \frac{\gamma}{Pr} \partial_i(K \partial_i T) + \gamma Ec \partial_i(\tau_{ij} V_j) - (\gamma - 1) q \eta \quad (2)$$

$$\partial_i(\rho V_i) = 0 \quad (3)$$

$$\partial_0(\rho Y) + \frac{1}{Pr} \partial_i(\rho Y V_i) = \frac{1}{Sc} \partial_i(D \partial_i Y) + \eta \quad (4)$$

$$\tau_{ij} = \mu \left(\partial_j V_i + \partial_i V_j - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_k V_k \right), \quad \partial_0 = \frac{\partial}{\partial t}, \quad \partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$$

where

$$Ec = \frac{\chi_0^2}{c_p T_0 H^2}, \quad Pr = \frac{\nu_0}{\chi_0}, \quad Sc = \frac{\nu_0}{D_0}, \quad Fr^2 = \frac{\chi_0^2}{g H^3}$$

- (1) ρ – плотность, V_i – компонента скорости, P – давление, T – температура, Y – массовая доля реагента, μ – скорость реакции, q – теплота химической реакции, τ_{ij} – тензор вязкого трения, n_i – единичный вектор. Ec , Pr , Sc , Fr – числа Eckert, Prandtl, Schmidt и Froude. D , K – безразмерные коэффициенты диффузии и теплопроводности. $c_p, T_0, g, \nu_0, \chi_0, D_0$ – теплоемкость при постоянном давлении, начальная температура, ускорение свободного падения, кинематическая вязкость, коэффициенты теплопроводности и диффузии отнесенные к начальной температуре.

Безразмерная скорость химической реакции:

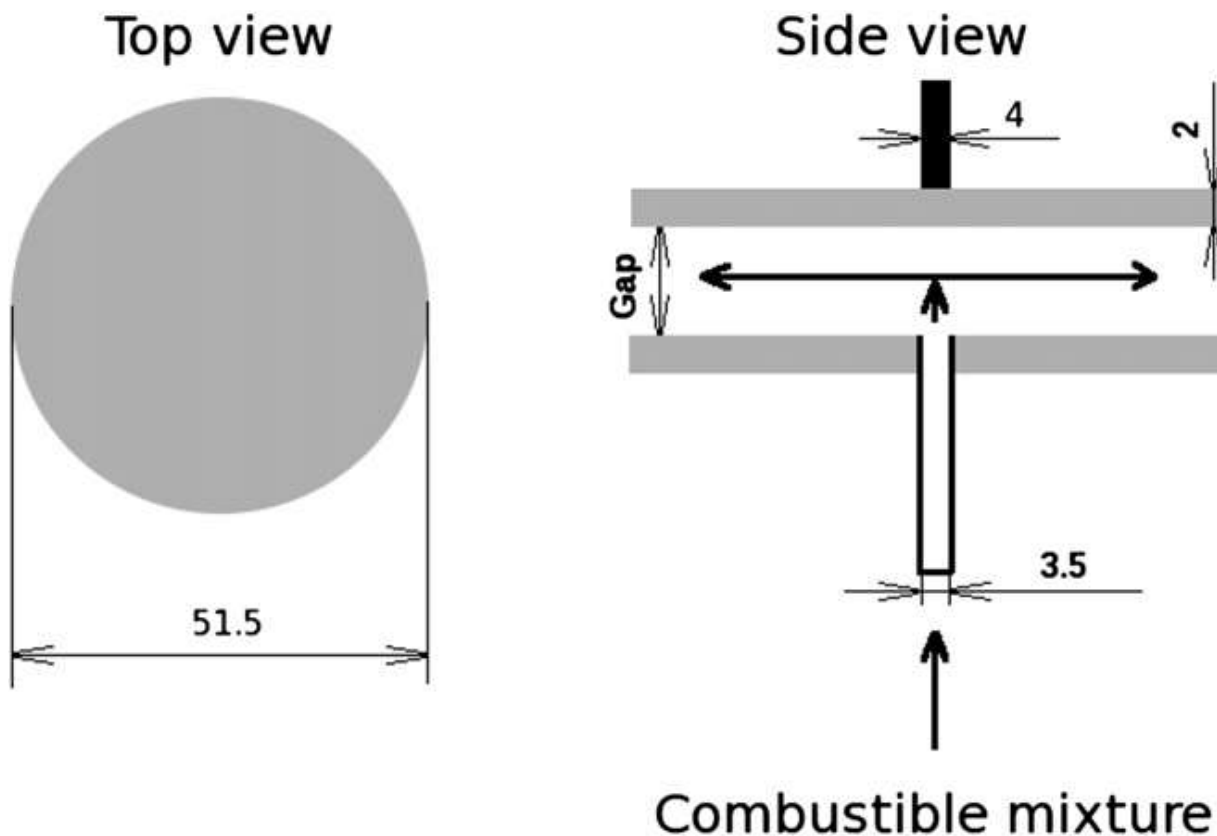
$$\eta = -A\rho Y e^{-\frac{Q}{T}}$$

A – предэкспонента, Q – энергия активации.

Температурная зависимость для вязкости, диффузии, коэффициента теплопроводности задавалась следующим образом:

$$v=D=K=T^n .$$

Граничные условия



Температура

В центре – комнатная.

Периферия - условие Неймана.

Верхняя и нижняя границы – комнатная.

Y - массовая доля горючего

Верхняя и нижняя границы - условие Неймана.

Периферия - условие Неймана.

Скорость

Верхняя и нижняя границы – прилипание.

Периферия - условие Неймана.

Давление

Верхняя и нижняя границы - условие Неймана.

Периферия – атмосферное.

В центре – выше атмосферного.

1. Программы написаны на языке C++. Уравнения газовой динамики используются в приближении неупругости, что отфильтровывает акустические волны.
2. Уравнения для компонент скорости приводятся к уравнению Пуассона для давления, которое решается методом быстрого преобразования Фурье (БПФ).
3. Программа БПФ была написана автором, никаких дополнительных пакетов не используется. Необходимые функции и переменные объединены в один класс, который может быть использован также в других программах.
4. Решение уравнения Пуассона осуществляется в два этапа. На первом производится разложение по пространственным гармоникам и после нахождения решения для каждой гармоники решение собирается из найденного набора гармоник. Таким образом, вместо решения уравнений для компонент скорости в пространстве гармоник, в них подставляется найденное готовое решение для давления и производится итерация для следующего временного шага. Использование такого метода оправдывает термин "полуспектральный" в отличие полного "спектрального" метода, когда окончательное решение в реальном пространстве собирается из гармоник для всех физических переменных после одной или нескольких итераций по времени.

5. Программа для расчётов является гибридной - OpenMP/MPI. Это позволяет легко её тестировать на обычном многоядерном компьютере. На суперкомпьютере используются $23 \times 12 = 276$ процессоров и один расчёт занимает порядка двух недель.

1. Пространственные шаги постоянны.
2. Размер расчётной сетки 505 точек по радиусу (r), 13 точек по вертикали (z), 261 точек по азимутальному углу.
3. На границах используются слои толщиной две точки для задания различных граничных условий.
4. Шаг по времени задаётся равным в безразмерных единицах 5×10^{-5} . Расчёты для установления стационарного состояния проводятся до времени $t \sim 50$. Т.о. требуется ~ 1 млн. шагов по времени для одного набора параметров.

1. В процессе расчётов на суперкомпьютере вывод основных результатов расчётов осуществляется в лог-файл через каждые 10 итераций по времени.
2. Поддерживается постоянное соединение между компьютером в Канаде и суперкомпьютером (ssh). Конец лог-файла выводится на экран (xterm), результаты расчётов проверяются время от времени. В случае необходимости задача останавливается и перезапускается с другими параметрами.
3. Предусмотрена автоматическая остановка задачи по достижению заданного времени или возникновения ошибки.

4. Для восстановления эволюции решений во времени проводится сохранение промежуточных расчетов через каждые $t=0.05$. Размер каждого файла в бинарном формате 64 Мб. Таким образом для одного расчёта требуется пространства на диске 64 Гб. Полученные результаты копируются на компьютер в Канаде, используя scp, а оригинальные файлы затираются на суперкомпьютере для освобождения места. Никаких требований на скорость копирования не накладываются. Стабильность связи хорошая, копирования объёма ~ 10 Гб проводится в течении нескольких часов и никак не влияет на ход расчётов. Общий объем "полезных" расчётов за 2015 г. составляет ~ 600 Гб. "Полезные" расчёты составляют примерно одну четверть от всех расчётов. 25% эффективности связан со спецификой задачи - невозможности предсказать конечный результат.

1. Разработка и улучшение программ ведётся на персональном компьютере с четырьмя ядрами. Используется операционная система CentOS 7 и система разработки Codeblocks.
2. Разработанные программы компилируются локально для проверки. Затем проводится компиляция на 8-ядерном сервере и делаются тестовые расчёты в режиме OpenMP. И только после этого программы переносятся на Суперкомпьютер, где компилируются, используя компилятор Интел (mpicc), и затем запускаются на счёт в гибридном варианте OpenMP/MPI.
3. Никаких других пакетов и систем не используется