

Параллельный алгоритм для двухфазной модели газ-твердые частицы с химическими реакциями и лазерным излучением¹

Пескова Е.Е., Снытников В.Н.

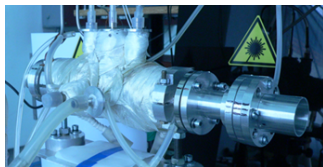
Институт катализа СО РАН,
Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

3 мая 2023 г.

¹ Доклад сделан при поддержке РФФ, проекты № 23-21-00202, № 21-19-00429

Постановка задачи

Лазерная конверсия углеводородов с получением этилена, пропилена, водорода – эндотермический процесс, который ведут в трубах с поглощением тепла от внешних источников.



Задачи:

- расширение разработанной ранее модели динамики многокомпонентного газа и твердых ультрадисперсных частиц под воздействием лазерного излучения на учет сложных кинетических схем, модификация численного алгоритма на использование схемы WENO реконструкции полиномов;
- параллельная реализация вычислений с использованием технологии MPI, исследование эффективности распараллеливания вычислений на модельных задачах.

Математическая модель

Система уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха с учетом лазерного излучения и ультрадисперсных частиц:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} - \frac{\partial H(U)}{\partial x} = W. \quad (1)$$

$$U = \begin{pmatrix} \rho_g Y_m \\ \rho_i \\ (\rho_g + \sum_i \rho_i) u \\ \rho_g h_g + \sum_i \rho_i h_i \end{pmatrix}, \quad F(U) = \begin{pmatrix} \rho_g u Y_m \\ \rho_i u \\ (\rho_g + \sum_i \rho_i) u^2 + p_d \\ \left(\rho_g h_g + \sum_i \rho_i h_i \right) u \end{pmatrix},$$

$$H(U) = \begin{pmatrix} J_m \\ 0 \\ 0 \\ q \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} R_m \\ 0 \\ 0 \\ \left(n_g \alpha + \sum_i n_i \alpha_i \right) F - \sum_i 4\pi s_i^2 n_i \sigma (T_i^4 - T_g^4) \end{pmatrix}.$$

Математическая модель²

Уравнение состояния:

$$p_g = \rho_g R T_g \sum_m \frac{Y_m}{M_{wm}}. \quad (2)$$

Уравнение для интенсивности излучения:

$$\frac{\partial F}{\partial x} + \left(n_g \alpha + \sum_{i=1}^N n_i \alpha_i \right) F = 0. \quad (3)$$

Уравнение для температуры частиц:

$$\frac{dm_i C_{DV} T_i}{dt} = \pi s_i^2 F - 4\pi s_i^2 \sigma (T_i^4 - T_g^4) - a\pi \frac{s_i^2}{2} p_g c_t \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \left(\frac{T_i}{T_g} - 1 \right) - QR. \quad (4)$$

²В. Н. Снытников, Е. Е. Пескова, О. П. Стояновская, “Модель двухтемпературной среды газ — твердые наночастицы с лазерным пиролизом метана”, Матем. моделирование, 35:4 (2023), 24–50

Численная схема решения задачи в подобласти

Структурированная сетка отрезков $\Delta_j, j = 1 \dots n_{cells}$.

V1: По методу расщепления из уравнений переноса массы выделяем систему уравнений только с источниковыми членами:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_g Y_1}{\partial t} = R_1, \\ \frac{\partial \rho_g Y_2}{\partial t} = R_2, \\ \dots \\ \frac{\partial \rho_g Y_m}{\partial t} = R_m, \end{cases} \quad (5)$$

V2: Решение уравнения для интенсивности излучения:

$$\frac{\partial F}{\partial x} + \left(n_g \alpha + \sum_{i=1}^N n_i \alpha_i \right) F = 0. \quad (6)$$

Численная схема решения задачи в подобласти

В3: Нахождение Y_m^{n+1} , ρ_g^{n+1} , ρ_i^{n+1} , \vec{u}^* , суммарной энтальпии газа и частиц:

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} + \frac{\tilde{F}_{j+1/2} - \tilde{F}_{j-1/2}}{h} - \frac{\tilde{H}_{j+1/2} - \tilde{H}_{j-1/2}}{h} - W_j = 0. \quad (7)$$

$\tilde{F}_{j+1/2} = \tilde{F} \left(U_{j+1/2}^r, U_{j+1/2}^l \right)$ – конвективные потоки,
 $\tilde{H}_{j+1/2}$ – диссипативные потоки.

$$\tilde{F}_{j+1/2} = 0.5 \left(\tilde{F} \left(U_{j+1/2}^r \right) + \tilde{F} \left(U_{j+1/2}^l \right) - \alpha_1 \left(U_{j+1/2}^r - U_{j+1/2}^l \right) \right),$$
$$\alpha_1 = \max \left(|u_{j+1/2}^r|, |u_{j+1/2}^l| \right),$$

В4: Решение уравнения для температуры частиц:

$$\frac{dm_i C_{DV} T_i}{dt} = \pi s_i^2 F - 4\pi s_i^2 \sigma (T_i^4 - T_g^4) - \quad (8)$$
$$a\pi \frac{s_i^2}{2} p_g c_t \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \left(\frac{T_i}{T_g} - 1 \right) - QR.$$

Численная схема решения задачи в подобласти

В5: Расчет температуры газа по известным значениям суммарной энтальпии смеси и температуры частиц.
Энтальпия частиц:

$$h_i(T_i) = C_{DV}T_i, \quad (9)$$

C_{DV} – теплоемкость вещества частиц.

Энтальпия газовой смеси:

$$h_g(T_g, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T_g), \quad (10)$$

где $h_m(T_g)$ – энтальпия компоненты m :

$$h_m(T_g) = \int_{T_{ref}}^{T_g} C_{pm}(T_g) dT_g + h_m^0, \quad (11)$$

$$C_{pm}(T_g) = a_0 + a_1 T_g + a_2 T_g^2 + a_3 T_g^3. \quad (12)$$

$$T_g = Newton(Y_m, h_g). \quad (13)$$

Численная схема решения задачи в подобласти

В6: Вычисление динамической составляющей давления p_d и скорости u :

$$u^{n+1} = u^* - \frac{\Delta t}{\rho_g^n + \sum_i \rho_i^n} \nabla p_d^{n+1}. \quad (14)$$

$$\Delta p_d^{n+1} = \frac{\rho_g^n + \sum_i \rho_i^n}{\Delta t} (\nabla \cdot u^* - S), \quad (15)$$

$$S \equiv \nabla \cdot u = \frac{1}{\rho_g C_p T_g} \left(- \sum_{i=1}^N \rho_i \frac{C_p (T_g - T_i)}{\zeta_i} + n_g \alpha F \right) \quad (16)$$

$$+ \frac{1}{\rho_g C_p T_g} \left(\nabla \cdot \lambda \nabla T_g + \sum_m \rho_g D_{m,mix} \nabla Y_m \nabla h_m \right) +$$
$$\frac{1}{\rho_g} \sum_m \frac{M_w}{M_{wm}} (\nabla \cdot \rho D_{m,mix} \nabla Y_m) + \frac{1}{\rho_g} \sum_m \left(\frac{M_w}{M_{wm}} - \frac{h_m}{C_p T_g} \right) R_m.$$

Схема работы параллельной программы

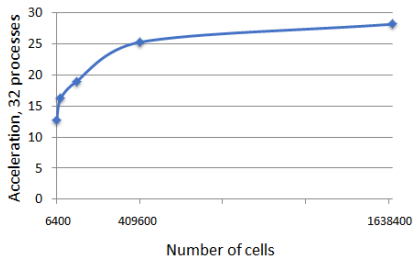
- 1 Модуль инициализации параллельных вычислений.
- 2 Модуль формирования начальных данных.
- 3 Модуль расчета граничных условий.
- 4 Модуль для выполнения блока В1 расчета уравнений химической кинетики.
- 5 Модуль для выполнения блока В2 расчета интенсивности излучения.
- 6 Модуль для выполнения блока В3 расчета газодинамических характеристик и концентраций на следующем шаге по времени.
- 7 Модуль для выполнения блока В4 расчета температуры частиц.
- 8 Модуль для выполнения блока В5 расчета температуры газа.
- 9 Модуль межпроцессорного обмена данными плотности, концентраций, энтальпии и предварительного вектора скорости.
- 10 Модуль для выполнения блока В6 расчета динамической составляющей давления и скорости потока.
- 11 Модуль межпроцессорного обмена данными динамической составляющей давления и скорости потока.
- 12 Модуль сохранения данных.

Анализ эффективности параллельного алгоритма

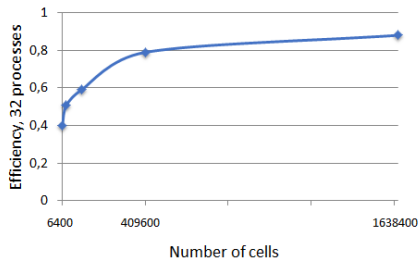
Таблица: Рабочая станция Intel Xeon CPU E5-2698 v4 2.20GHz x 40

n_{cells}	n_{proc}	Time, sec	Acceleration, %	Efficiency, %
6400	1	10.34	1	1
	4	2.8	3.69	0.92
	16	1.0	10.34	0.64
	32	0.81	12.76	0.4
102400	1	162.35	1	1
	4	41.5	3.91	0.98
	16	13.3	12.21	0.76
	32	8.58	18.92	0.59
1638400	1	2604.16	1	1
	4	664.1	3.92	0.99
	16	180.2	14.45	0.90
	32	92.5	28.15	0.88

Анализ эффективности параллельного алгоритма



Зависимость ускорения от числа расчетных ячеек



Зависимость эффективности от числа расчетных ячеек

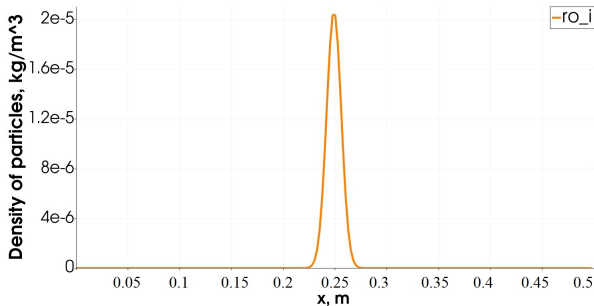
Численные эксперименты

Отрезок длиной 0.5 м.

$$u_{in} = 0.05 \text{ м/с}, p = 101325 \text{ Па}, T_{in,g} = 1073 \text{ К}, T_{in,i} = 1073 \text{ К},$$

$$F_{in} = 1.6 \cdot 10^{11} \text{ Вт/м}^2, Y_{in,CH_4} = 1, Y_m = 0, m = 2, \dots, M,$$

$$s_i = 5 \cdot 10^{-9} \text{ м}, n_{i,max} = 10^{16} \text{ частиц/м}^3.$$



Распределение плотности частиц, $t=0$ сек.

$$h_x = 2.5 \cdot 10^{-3} \text{ м}, \Delta t = 1.0 \cdot 10^{-5} \text{ сек.}$$

№		Reaction	A_i, sec^{-1} or $\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{sec}^{-1}$	$E_i, \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
1	1f	$\text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{CH}_3$	$2.4 \cdot 10^{16}$	366.0
	1b	$\text{CH}_3(\text{s}) + \text{CH}_3(\text{s}) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	$14.04 \cdot 10^7$	5.9
2	2f	$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_5$	$3.26 \cdot 10^6$	50.24
	2b	$\text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_6$	$21.08 \cdot 10^6$	90.0
3	3f	$\text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$	$2.0 \cdot 10^{13}$	166.0
	3b	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5$	$1.0 \cdot 10^7$	6.3
4	4f	$\text{H} + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_5$	$1.0 \cdot 10^8$	40.16
	4b	$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{H} + \text{C}_2\text{H}_6$	$3.98 \cdot 10^7$	96.45
5	5f	$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_7$	$3.3 \cdot 10^5$	32.26
	5b	$\text{C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4$	$3.0 \cdot 10^{14}$	139.0
6	6f	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_6$	$1.65 \cdot 10^5$	3.34
7	7f	$\text{C}_3\text{H}_7 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_3\text{H}_6$	$2.65 \cdot 10^4$	27.6
8	8f	$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_3$	$4.16 \cdot 10^6$	46.56
	8b	$\text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4$	$8.9 \cdot 10^4$	25.94
9	9f	$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_2$	$9.03 \cdot 10^6$	3.2
10	10f	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$	$1.2 \cdot 10^7$	0.0
11	11f	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$	$7.59 \cdot 10^7$	49.89
	11b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$	$3.3 \cdot 10^6$	51.05
12	12f	$\text{CH}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$	$8.0 \cdot 10^8$	111.0
	12b	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{CH}_3$	$1.08 \cdot 10^8$	3.64
13	13f	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	$5.42 \cdot 10^8$	62.36
	13b	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$	$9.7 \cdot 10^4$	34.75
14	14f	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3(\text{s}) + \text{H}$		100.0
	14b	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_4$	$1.9 \cdot 10^8$	1.15
15	15f	$\text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}$	$6.93 \cdot 10^{12}$	186.0
	15b	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3$	$54.98 \cdot 10^5$	10.6
16	16f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}$	$33.72 \cdot 10^4$	32.03
	16b	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{CH}_3$	$49.98 \cdot 10^6$	16.74
17	17f	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3 + \text{H}_2$	$7.23 \cdot 10^7$	18.87
18	18f	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{C}_3\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + \text{H}$	$6.99 \cdot 10^5$	50.21
19	19f	$\text{C}_6\text{H}_6 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_5$	$26.2 \cdot 10^6$	80.9
	19b	$\text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6 + \text{CH}_3$	$19.99 \cdot 10^5$	36.0
20	20f	$\text{C}_3\text{H}_3 + \text{C}_3\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6$	$8.85 \cdot 10^7$	48.0

Численные эксперименты

Скорости протекания реакций в газовой фазе определяются из выражения:

$$w_r = k_r \cdot \prod_c Y_m, \quad k_r = A_r \cdot e^{-E_r/RT_g}.$$

Здесь r – номер реакции в газовой фазе, m – номер компоненты газа, вступающей в r -ю реакцию.

Скорость протекания реакции 1b определяется из выражения:

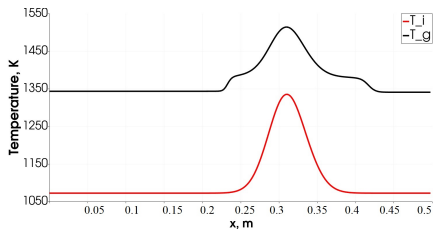
$$w_{1b} = k_{1b} \cdot [CH_3(s)] \cdot [CH_3(s)],$$
$$k_{1b} = A_{1b} \cdot e^{-E_{1b}/RT_i}.$$

Скорость протекания реакции 14f

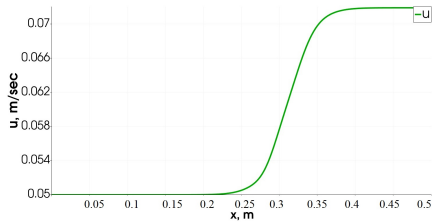
$$w_{14f} = k_{14f} \cdot [CH_4],$$
$$k_{14f} = \alpha_1 \pi s_i^2 n_i \sqrt{\frac{8k_B T_g}{\pi m_{CH_4}}} \cdot e^{-E_{14f}/RT_i},$$

где $\alpha_1 = 1$ – константа.

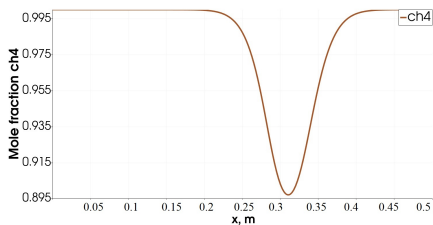
Численные эксперименты



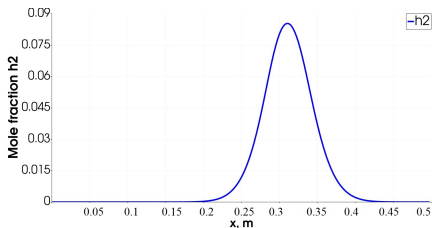
Температура



Скорость



Мольная доля метана



Мольная доля водорода

Заключение

- Для одномерной математической модели динамики реагирующего газа и ультрадисперсных частиц с лазерным излучением и радикальным кинетическим механизмом разработан параллельный решатель, реализующий метод конечных объемов с повышением порядка точности WENO схемой.
- Проведено исследование эффективности разработанных алгоритма и программы.
- Проведены расчеты модельной задачи, показана адекватность получаемых результатов вычислительного эксперимента с возможностью дальнейшего применения полученной программы к экспериментальным задачам.

Перспективы развития. Применение метода локальных итераций для диссипативной части уравнений. Реализация алгоритма для решения трехмерных задач в сложной геометрии течения.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!