

# Использование высокопроизводительных вычислений при математическом моделировании течений газозвеси в канале с перегородками

О. Ф. Бакирова, К. И. Михайленко, Д. Ф. Марьин

Исследовался процесс осаждения частиц газозвеси на стенки узкого канала, имеющего ряд перегородок. В математической модели в качестве упрощения принято отсутствие влияния дисперсной среды на поток несущей фазы. Также мы пренебрегли взаимодействием между частицами среды. Таким образом, математическая модель включает в себя уравнения Навье — Стокса, описывающие течение газовой фазы и ряда уравнений Ньютона, каждое из которых определяет эволюцию отдельной частицы под влиянием силы Стокса со стороны газовой фазы. Используемый численный алгоритм базируется на методе крупных частиц. Для увеличения производительности программы использован интерфейс MPI. Реализован параллелизм по пространству.

## 1. Введение

В технических системах часто встречаются такие случаи течений двухфазных систем, когда одна из фаз представляет собой мелкодисперсную среду. При этом, если рассматривается течение в каком-либо канале, то возникающие задачи зачастую сводятся к одной из двух:

- необходимо минимизировать процесс осаждения дисперсной фазы на стенки канала;
- необходимо добиться полного осаждения дисперсной фазы на стенках канала.

В обоих случаях важен вопрос нахождения допустимой длины канала, либо таких условий течения для определенных размеров и плотности частиц дисперсной фазы, при которых осаждение на заданной длине минимально, либо максимально.

Представленная в работе задача появилась в рамках небольшого исследования, направленного на нахождение эффективной конфигурации выходной камеры установки конденсации серы. В первую очередь рассматривался вопрос осаждения капель жидкой серы на предназначенные для этого поверхности. Таким образом, наиболее важным для задачи стал параметр, определяющий, какое количество дисперсных частиц (капель) известного размера, движимых потоком газа, достигнет стенок.

## 2. Математическая модель

Построение модели рассматриваемого процесса базируется на основных гипотезах механики многофазных сред [1]. Математическую модель запишем, исходя из следующих предположений:

- концентрация частиц дисперсной фазы мала, то есть будем пренебрегать явлениями, связанными взаимодействием частиц между собой;
- взаимодействие между частицами и жидкостью носит односторонний характер, то есть частицы не оказывают обратного влияния на характеристики потока;
- частицы перемещаются под действием силы Стокса.

Действительно, если частицы газозвеси имеют микронные размеры, то при объемных концентрациях дисперсной фазы  $\alpha_2 \ll 0,01$  все предположения допустимы.

- Расстояния между частицами будут много больше их геометрических размеров, следовательно столкновения между частицами будут редки и явлениями, связанными с этими столкновениями, можно пренебречь.
- Величина силы межфазного воздействия в системе газ — дисперсная среда может быть оценена интегральным выражением

$$\mathbf{F}_{ij} = \eta_\mu \frac{\alpha_i \alpha_j}{d^2} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j),$$

где  $\eta_\mu$  представляет собой структурный коэффициент, определяемый формой и поверхностью частицы, и для случая гладких сфер  $\eta_\mu = \frac{9\mu}{2}$  [1];  $\alpha_i$  — концентрация соответствующей фазы;  $d$  — диаметр частицы дисперсной фазы;  $\mathbf{v}_i$  — скорость  $i$ -й фазы. Легко видеть, что для случая малой величины вязкости несущей фазы  $\mu$  (газ) и малой концентрации одной из фаз сила межфазного взаимодействия будет пренебрежимо мала.

- С другой стороны, воздействие на каждую отдельную дисперсную частицу со стороны несущей фазы будет велико в связи с малой массой частицы. Поэтому будем рассматривать движение частиц, удовлетворяющих условию  $St < 0.1$ , где  $St = \frac{\tau}{T}$  — число Стокса ( $\tau$  — характерное время релаксации частицы, а  $T$  — характерный масштаб времени потока [2]). Кроме того пренебрежем силами Архимеда, Жуковского и другими по сравнению с силой Стокса.

С учетом сказанного математическая модель может быть записана в виде двух независимых задач.

Поток газа будем описывать в виде системы уравнений Навье — Стокса (уравнения движения, неразрывности, энергии) в декартовой системе координат:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \mathbf{v}) + \frac{\partial p}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \mathbf{v}) + \frac{\partial p}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial \rho w}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho w \mathbf{v}) + \frac{\partial p}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E \mathbf{v}) + \operatorname{div}(p \mathbf{v}) &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $u, v, w$  — составляющие вектора скорости  $\mathbf{v}$ .

Решение представленной задачи определяется также соответствующим выбором начальных и граничных условий. Например, будем находить установившееся течение в канале, имеющем ряд перегородок-препятствий при заданном объемном расходе несущей фазы.

После получения поля скорости газа можно решать задачу о траектории частицы. Траектория может быть найдена из уравнения [3, 4]:

$$\frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \mathbf{F}_p, \quad (2)$$

где составляющие вектора скорости частицы  $\mathbf{v}_p$   $u_p, v_p, w_p$  определяются из уравнений

$$u_p = \frac{dx}{dt}, \quad v_p = \frac{dy}{dt}, \quad w_p = \frac{dz}{dt},$$

а вектор  $\mathbf{F}$  — это сила, действующая на частицу со стороны потока газа. В нашем случае это сила Стокса

$$\mathbf{F} = 3\pi\mu d(\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_p).$$

Таким образом, уравнения (1)–(2) описывают движение одиночной сферической твердой частицы малого размера в потоке газа. Однако следует отметить, что в случае установившегося течения (система уравнений (1)), система уравнений (2) может решаться независимо для введенных нами исходных предположений.

### 3. Численный алгоритм

В соответствии с постановкой математической модели, вычислительный процесс делится на две подзадачи. Данные подзадачи могут решаться как последовательно, когда сначала производится расчет установившегося течения, а лишь затем запускаются частицы, так и совместно, когда и поля скорости и давления для жидкости и новые положения частиц вычисляются на каждом шаге по времени. При последовательном решении мы получим описание движения частиц на фоне установившегося поля течения газа. При совместном, — развитие процесса во времени.

Задача о течении газа нами решалась методом крупных частиц [6]. В данном методе вычислительная область разбивается на элементарные ячейки — крупные частицы (аналог конечных объемов). Вычисления, производимые над крупными частицами на каждом временном шаге, подразделяются на три этапа.

На эйлеровом этапе пренебрегаем всеми эффектами, связанными с перемещением элементарной ячейки (потока массы через ячейку нет), и учитываем эффекты ускорения жидкости лишь за счет давления. Таким образом изменяются лишь величины, относящиеся к ячейке в целом, а жидкость предполагается заторможенной. Поэтому конвективные члены вида:  $\text{div}(\varphi\rho W)$ , где  $\varphi = (1, u, v, w, E)$ , соответствующие эффектам перемещения, в системе уравнений Навье — Стокса на данном этапе игнорируются.

На лагранжевом этапе вычисляются потоки массы через границы эйлеровых ячеек. То есть данный этап характеризует перемещение расчетных ячеек относительно жидкости — здесь вычисляются эффекты переноса, учитывающие обмен между ячейками при их перестройке на прежнюю эйлерову сетку (моделируется движение потока массы через границы эйлеровых ячеек и находятся смещения расчетных точек).

На заключительном этапе определяются окончательные значения газодинамических параметров потока  $\psi(u, v, w, E, \rho)$  на основе законов сохранения массы, импульса и энергии для каждой ячейки и всей системы в целом на фиксированной расчетной сетке.

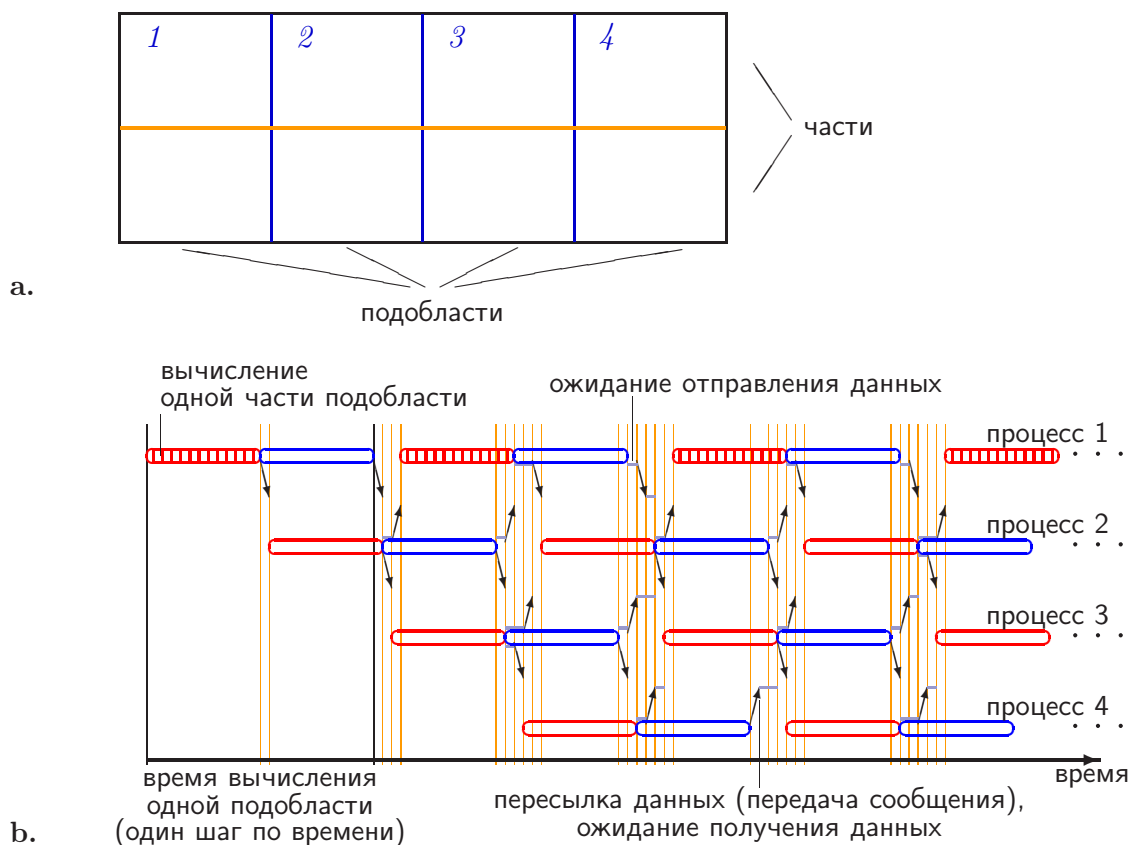
Вторая подзадача представляет собой простое решение уравнения Ньютона, описывающего движение отдельной частицы в поле скорости газа.

### 4. Параллельный алгоритм

Первая подзадача является весьма ресурсоемкой при расчете в трехмерной области и при учете мелких деталей (большое количество узловых точек вычислительной сетки), в связи с чем возникла необходимость использования методов высокопроизводительных вычислений.

Однако прямое использование параллелизма по пространству для данной задачи представляется невыгодным. Это связано с тем, что в ряде случаев в указанной задаче возникают слишком протяженные теневые границы и, соответственно, простой процессоров (низкая эффективность распараллеливания) в моменты обмена теневыми гранями.

Улучшить загрузку процессоров позволяет такая организация вычислительного процесса, когда подобласть рассчитывается не целиком, а по частям, с промежуточной пересылкой данных.



**Рис. 1.** Расчетная область (а) и пространственно-временная диаграмма (б) для случая декомпозиции по топологии «линейка» с дополнительным разбиением подобластей на две части.

На Рис. 1(а) представлена схема разбиения расчетной области, предусматривающая выделение в каждой подобласти двух частей. При этом обмен теньевыми гранями производится после расчета каждой из частей подобласти. Такой подход позволяет заметно увеличить производительность, что отражено на пространственно-временной диаграмме на Рис. 1(б). Заштрихованные горизонтальные полосы на диаграмме описывают стадию вычисления процессом первой части своей подобласти, а незаштрихованные — вычисление второй части.

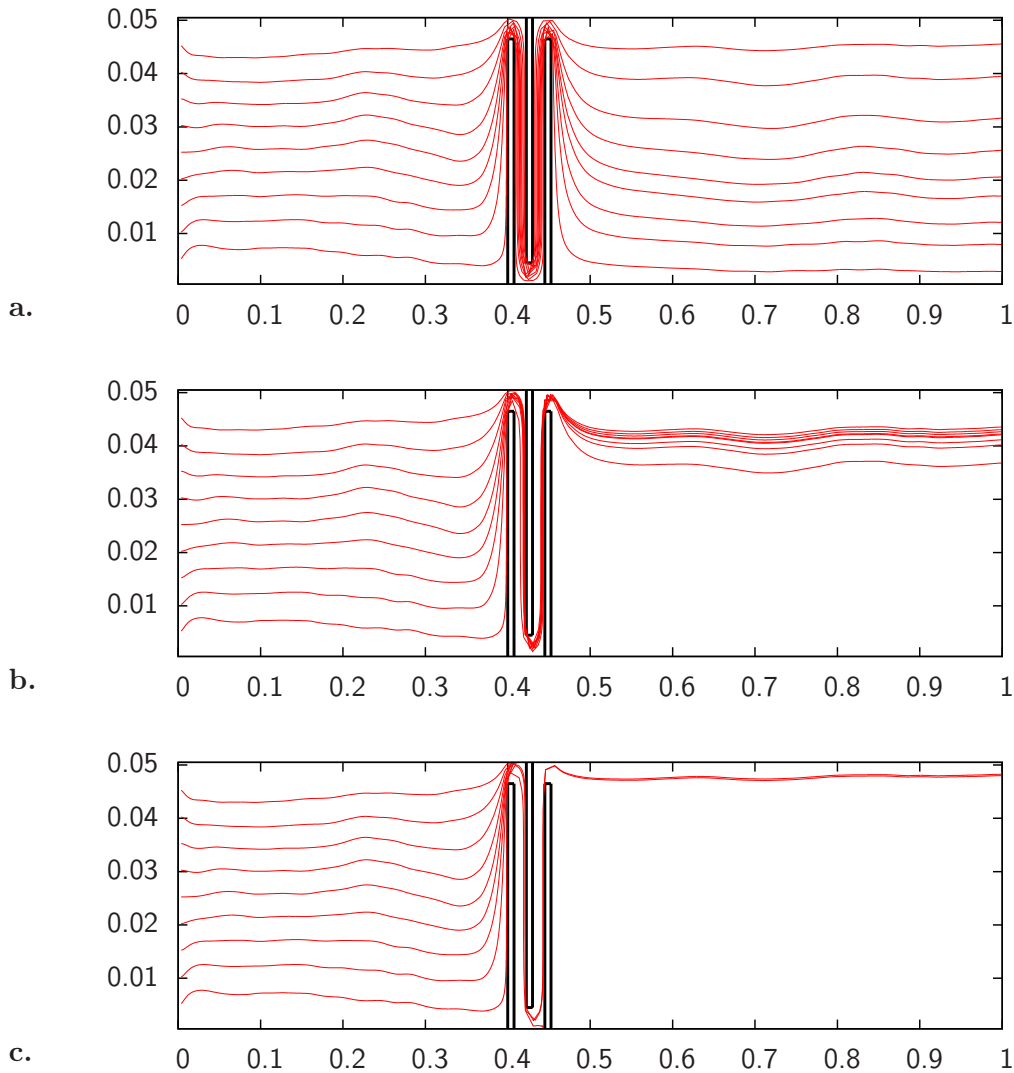
Для объяснения роста производительности рассмотрим ход вычислительного процесса.

После окончания расчета первой части подобласти каждый процесс отправляет необходимые результаты соседям и, не дожидаясь получения данных, переходит к расчету второй части своей подобласти. К моменту завершения этого расчета данные, отправленные ранее, уже получены, потому каждый процесс рассылает теньевые грани после расчета второй части подобласти и переходит к следующему временному шагу. Далее процесс повторяется.

В том случае, если время расчета одной части подобласти значительно превосходит времена пересылок данных, эффективность представленного алгоритма оказывается весьма высока.

## 5. Результаты исследования движения частиц

Проводилось математическое моделирование движения небольших дисперсных частиц ( $d \approx 10^{-4}$  м,  $\rho_p \approx 10 \div 10^3$  кг/м<sup>3</sup>), разгоняемых потоком вязкого газа ( $\rho_g \approx 1$  кг/м<sup>3</sup>,  $\mu \approx 10^{-3}$  Па·с). Рассматривалась область длиной 0,5 м и диаметром 0,005 м (труба). В середине

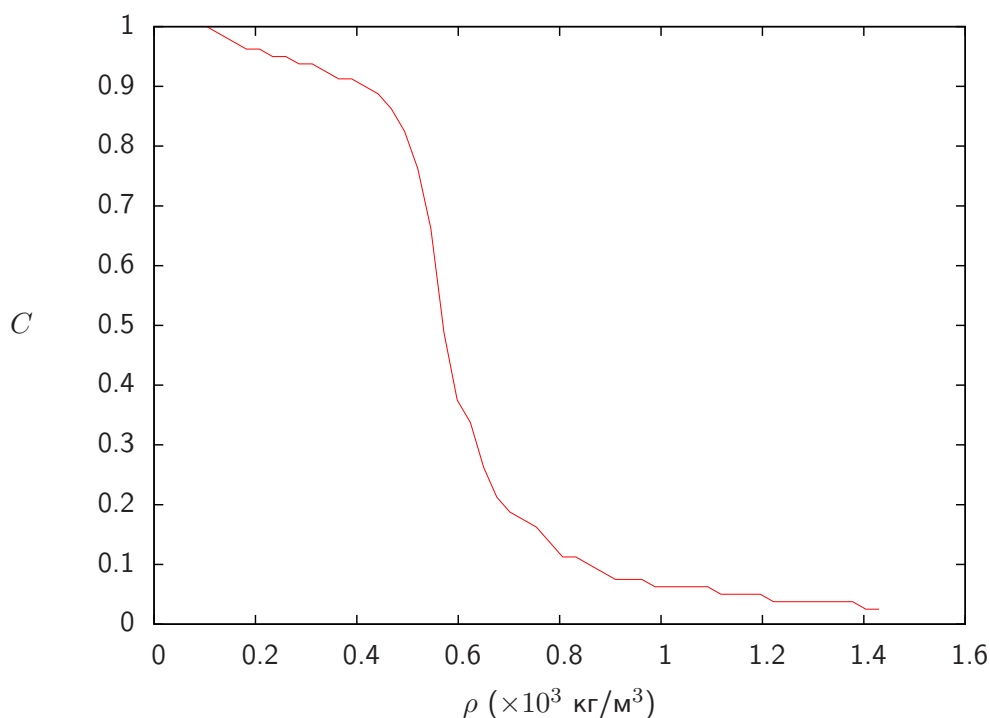


**Рис. 2.** «Фокусировка» потока частиц в канале в зависимости от плотности:  $\rho = 10 \text{ кг/м}^3$  (a);  $\rho = 400 \text{ кг/м}^3$  (b);  $\rho = 700 \text{ кг/м}^3$  (c).

трубы установлен ряд перегородок, призванных резко изменять направление движения газа для увеличения осаждения дисперсных частиц на стенках трубы и перегородках.

На Рис. 2 представлен ряд результатов моделирования движения твердых частиц разных плотностей под действием установившегося потока вязкого зага в канале с перегородками. В частности, приведены результаты трех расчетов, для случаев, когда плотность вещества частиц равна 10, 400 и 700  $\text{кг/м}^3$ . (На Рис. 2 по осям отложены относительные разеры канала, когда за единицу принята длина канала). С ростом массы (при неизменном размере) несомых потоком частиц наблюдается два эффекта. Во-первых, происходит «фокусировка» потока частиц. То есть достаточно массивные частицы образуют подобие струи за преградой. Вслед за образованием струи резко сокращается и количество частиц, преодолевших препятствие. Последний эффект особенно хорошо заметен при анализе кривой (Рис. 3), показывающей отношение  $C = N_1/N_0$  числа частиц на выходе из канала по сравнению с их количеством на входе в зависимости от их плотности.

На последнем графике мы можем видеть наличие некоторой критической плотности  $\rho_{\text{кр}} \approx 0,5 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ . Характерным следует считать тот факт, что примерно для этой же и бльших плотностей частиц их поток на выходе из преграды оказывается хорошо сфокуси-



**Рис. 3.** Зависимость относительной концентрации частиц на выходе из канала от их плотности

рован в тонкую струю.

Таким образом, можно сделать вывод, что для улучшения осаждения частиц из потока газа кроме наличия перегородок и отбойников, на стенках которых может проходить осаждение, следует также постараться обеспечить предварительную сепарацию частиц из потока в отдельную тонко сфокусированную струю.

## 6. Заключение

В работе показано использование некоторых эффективных подходов к распараллеливанию решаемой задачи в случае использования достаточно сложной схемы газовой динамики при наличии дополнительных подзадач.

Получены результаты математического моделирования осаждения дисперсных частиц в канале с преградами. Полученные результаты представляют интерес с точки зрения ряда технологических процессов, связанных с сепарацией дисперсной фазы из газового потока.

## Литература

1. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. т. 1. — М.: Наука. — 1987. — 464 с.
2. Шрайбер А. А., Гавин Л. Б., Наумов В. А., Яценко В. П. Турбулентное течение газозвеси. — Киев: Наук. думка, — 1987. — 240 с.
3. Соу С. Гидродинамика многофазных сред. — М.: Мир, 1971. — 536 с.
4. Систер В. Г., Мартынов Ю. В. Исследование процесса сепарации жидких капель в винтовом канале // ТОХТ — 1993. Т. 27, №3. — С. 264–269.
5. Михайленко К. И., Урманчеев С. Ф. Математическое моделирование спиральных течений дисперсных систем // Труды Математического центра им. Н. И. Лобачевского.

- Т. 27. / Казанское математическое общество. Модели механики сплошной среды. // Материалы XVII сессии Международной школы по моделям механики сплошной среды. — 2004. — С. 182–187.
6. Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М. Метод крупных частиц в газовой динамике. — М.: Наука, 1982. — 392 с.
  7. Газизов Р. К., Лукашук С. Ю., Михайленко К. И. Разработка параллельных алгоритмов решения задач механики сплошной среды на основе принципа пространственной декомпозиции // Вестник УГАТУ. — 2003. Т. 4, №1. — С. 100–107.