УДК 533.6.011.72:541.126.2

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В УДАРНОЙ ТРУБЕ НА МНОГОПРОЦЕССОРНОМ КОМПЬЮТЕРЕ

C. B. Куликов¹, O. H. Терновая¹

В расчетах процесса образования ударной волны в ударной трубе использовался нестационарный метод статистического моделирования с весовыми множителями, который автоматически учитывает все процессы тепломассопереноса. Параллельные вычисления проводились с помощью библиотеки MPI путем блочной декомпозиции области моделирования практически без ограничений на число используемых процессоров. Получаемые положения волны разрежения, пробки и фронта, а также значения параметров хорошо совпали с рассчитываемыми по упрощенной теории ударных труб.

Ключевые слова: газовая смесь, нестационарный метод статистического моделирования, весовой множитель, блочная декомпозиция, ударная труба, ударная волна, волна разрежения.

1. Введение. Развитие авиации, космонавтики и ударно-волновых технологий приводит к необходимости решения задач газовой динамики и кинетической теории газов, в основе которых лежит уравнение Больцмана. Используемый в данной работе нестационарный метод статистического моделирования (HMCM), основоположником которого является Г. Берд [1, 2], позволяет избежать трудоемкого процесса прямого численного решения уравнения Больцмана. Интенсивное развитие вычислительной техники способствует тому, что HMCM все шире применяется в указанных областях науки и техники. В частности, в настоящее время появилась возможность решать с помощью HMCM трудоемкие газодинамические задачи, в которых меняется соотношение локальной средней длины свободного пробега λ и соответствующего характерного размера R. При этом в одной части области потока может быть $\lambda \sim R$ (число Кнудсена Kn \sim 1), а в другой $\lambda \ll R$ (Kn \ll 1). В данном случае очень актуальным становится использование многопроцессорных ЭВМ.

К таким задачам относится численное изучение процесса образования ударной волны в ударной трубе для случая газовой смеси. Интересные результаты, полезные для планирования и истолкования эксперимента, могут быть получены при изучении размытости границ пробки со стороны камеры высокого давления (КВД) ударной трубы и при расчете течения после достижения волной разрежения торца КВД. Кроме того, такое моделирование является предварительной стадией для моделирования процесса установления детонации в ударной трубе. Следует отметить, что НМСМ автоматически учитывает все детали процесса тепломассопереноса.

2. Способ моделирования. Численно моделировался процесс формирования ударной волны в ударной трубе. Труба состоит (рис. 1) из КВД и канала низкого давления (КНД). В КВД помещается газ (толкатель при высоком давлении), а в КНД — газовая смесь при более низком давлении. Полагалось, что поперечные сечения КВД и КНД постоянны и равны друг другу. КВД и КНД разделялись диафрагмой при их заполнении газами. Последняя удалялась в начальный момент моделирования.



Рис. 1. Схема ударной трубы: 1 — канал низкого давления, 2 — камера высокого давления, 3 — диафрагма

Используемая разновидность нестационарного метода статистического моделирования с весовыми множителями описана в [3, 4]. Суть его состоит в следующем. Моделируемая газовая среда заменяется системой модельных частиц. Исследуемое пространство разбивается на ячейки размера Δx , по которым в соответствии с начальными условиями распределяются частицы. Полагается, что столкновения частиц

¹ Институт проблем химической физики РАН, просп. Семенова, 18, 142432, Московская обл., Ногинский район, п. Черноголовка; e-mail: kuls@icp.ac.ru

[©] Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М. В. Ломоносова

являются парными и могут происходить с определенной вероятностью только между частицами, находящимися в одной ячейке. Весовой множитель показывает число реальных молекул, представленных модельной частицей.

Процесс эволюции рассматриваемой системы за интервал времени Δt расщепляется на два этапа:

1) только перемещение частиц с неизменными скоростями в промежутке времени $\Delta t;$

2) только изменение скоростей частиц в результате их столкновений, происходящих с определенными вероятностями в этом же промежутке времени при их фиксированных положениях.

Моделирование проводилось в одномерном пространстве координат и в трехмерном пространстве скоростей. Иными словами, отслеживалось только движение молекул вдоль ударной трубы. При моделировании столкновений молекул рассматривались все три составляющие их скоростей.

Молекулы представлялись как жесткие сферы без внутренней структуры. В начальный момент в КВД ударной трубы помещался газ с молекулярной массой (μ), как у H₂. В канал низкого давления (КНД) помещалась смесь газов с μ , как у Xe, O₂, He и H₂, с отношением мольных концентраций 1 : 10 : 169 : 20 и диаметров 1.000 : 0.737 : 0.443 : 0.540 соответственно. Полагалось, что на границах области моделирования молекулы упруго отражались от стенок. Температуры неподвижных газов в КВД и КНД (T_1) задавались одинаковыми, а отношение давлений — равным 100. Для того чтобы размер пространственной ячейки не превышал λ , область моделирования в КВД первоначально разбивалась на ячейки в 20 раз меньшего размера Δx , чем в КНД. Во время счета в той части КНД, куда поступил H₂ из КВД, размер Δx уменьшался также в 20 раз.

Для того чтобы использовать разумное число модельных частиц, весовые множители частиц, представляющих молекулы водорода, для КВД тоже были гораздо больше, чем для КНД (в 50 раз). Но внутри каждой из этих областей для всех частиц одного сорта весовые множители равнялись друг другу.

Время расщепления этапов перемещений и столкновений было $\Delta t = 0.04 \lambda_{\rm H}/u$, где u — наиболее вероятная тепловая скорость частиц самого легкого сорта в потоке перед волной. Первоначально в КНД $\Delta x = 0.15 \lambda_{\rm H}$, где $\lambda_{\rm H}$ — средняя длина свободного пробега в КНД в начальный момент времени.

Параллельные вычисления были организованы как на 44, так и на 175 процессорах ЭВМ МВС1000М. Применялась блочная декомпозиция области моделирования (соответственно 480 и 4500 в единицах $\lambda_{\rm H}$). При этом область моделирования разбивалась на ряд доменов, эволюция подсистемы в каждом из которых моделировалась только одним процессором. Каждый раз после проведения этапа перемещений информация о частицах, покидающих домены, в которых они находились в начале данного этапа, и переходящих в соседние, пересылалась с помощью процедур SEND и RECV библиотеки MPI [5]. Это дает возможность при увеличении числа процессоров вплоть до нескольких тысяч увеличивать размер области моделирования без увеличения времени счета при фиксированном времени эволюции системы, поскольку обмен информацией выполняется только между соседними доменами, а время передачи информации не зависит от числа процессоров. Как показал предыдущий опыт [6], такая организация параллельных вычислений является, вероятно, наиболее разумной. При использовании мелкозернистого параллелизма [6] невозможно эффективное применение более 10-15 процессоров. Однако при применении блочной декомпозиции приходится мириться с неравномерной загрузкой процессоров. Это связано, во-первых, с различным числом модельных частиц в доменах. Чем больше частиц, тем дольше идет реализация этапов столкновений и перемещений. Процессорам требуется различное время для реализации этих этапов за интервал эволюции системы Δt . Поэтому большая часть процессоров, прежде чем выполнить операции пересылки, ждет наиболее загруженных из них. Во-вторых, при проведении моделирования загрузка процессоров меняется. Это связано с движением ударной волны и соответственно с изменением числа модельных частиц в доменах. Поэтому невозможно подобрать такие размеры доменов, которые позволили бы сделать данный дисбаланс процессоров незначительным. Был выполнен анализ этого дисбаланса, который проводился за достаточно большой период времени, но не превышающий времени прохождения домена ударной волной. Он показал, что за этот период эффективное время работы наименее занятого процессора может составлять порядка 10% от времени работы наиболее загруженного даже при подборе достаточно оптимальных размеров доменов.

3. Результаты расчетов. На рис. 2–5 приведены результаты моделирования на 44 процессорах. При этом в начальный момент времени среднее число частиц в одной ячейке как в КНД, так и в КВД ($N_{\rm H}$) равнялось 360. На рис. 2 показаны профили макропараметров, полученные для H₂. Здесь и далее расстояние нормировано на $\lambda_{\rm H}$, продольная скорость v — на u, концентрация n — на $n_{\rm Xe}$, кинетические температуры T — на T_1 . Хорошо виден сформировавшийся фронт ударной волны. За ним находится зона ударно сжатой и нагретой смеси, находящейся в канале низкого давления (так называемая пробка). Далее располагается зона газа-толкателя, первоначально находящегося в камере высокого давления, движущегося со скоростью пробки и имеющего такое же давление, как и в пробке. За ней следует волна разрежения (ВР), в которой *v* меняется до нуля, и затем — невозмущенный газ в КВД.



Рис. 2. Профили продольной скорости v, концентрации n, продольной (- - -) и полной (——) кинетических температур $T_{\rm H_2}$ в момент времени $t = 150 \, \lambda/u$. Первоначальная поверхность разрыва (граница между КНД и КВД) находилась в точке $24 \, \lambda_{\rm H}$ (вертикальная линия)



Рис. 3. Профили продольной скорости v, концентрации n, продольной (- -) и полной (—) кинетических температур H₂ в момент времени 70 λ/u и 150 λ/u

На рис. 3 показаны профили макропараметров H_2 для двух различных моментов времени. Как видно, в месте первоначального нахождения поверхности разрыва (на границе между КНД и КВД в точке 24 $\lambda_{\rm H}$, вертикальная линия) скорость, температура, концентрация (соответственно и давление) для ВР со временем практически не меняется. Это следует из автомодельности ВР [7].

На рис. 4 показаны полученные профили для ксенона, который присутствует только перед фронтом ударной волны и в пробке. Отчетливо видно, что температура на передней кромке фронта ударной волны превышает равновесную в пробке за фронтом. Для продольной температуры этот сверхравновесный пик гораздо выше, чем для полной температуры.

На рис. 5 показаны полученные аналогичные профили для He — самого представительного компонента из тех, которые присутствуют только перед фронтом ударной волны и в пробке. Как видно,





Рис. 4. Профили v, n, продольной (- - -) и полной (—) кинетических температур для Хе (самый тяжелый и самый малый компонент, который присутствует только перед фронтом ударной волны и в пробке) в моменты времени 70 $\lambda_{\rm H}/u$ и 150 $\lambda_{\rm H}/u$

Рис. 5. Профили продольной скорости, концентрации, продольной (- -) и полной (—) кинетических температур для Не в моменты времени $70 \lambda_{\rm H}/u$ и $150 \lambda_{\rm H}/u$ (Не присутствует только перед фронтом ударной волны и в пробке)

не обнаруживается заметный сверхравновесный пик поступательной температуры на передней кромке фронта ударной волны.



Рис. 6. Профили продольной скорости, концентрации, продольной (- - -) и полной (——) кинетических температур H₂ в момент времени t = 1271.85 λ_H/u. Используются 175 процессоров. Первоначальная поверхность разрыва (граница между КНД и КВД) находилась в точке 745 λ_H

На рис. 6 показаны профили макропараметров, полученные с использованием 175 процессоров. При

этом $N_{\rm H} = 90$ и приблизительно в 10 раз увеличена область моделирования.

Получаемые положения волны разрежения (ВР) пробки и фронта (см. таблицу), а также значения его параметров и в этом случае хорошо совпадают с рассчитываемыми по упрощенной теории ударных труб [7, 8]. Так, по температуре за фронтом ударной волны (T_2) результаты моделирования ($T_2/T_1 = 3,4$) до 3% совпадают с расчетами по упрощенной теории ударных труб. При этом параметры за фронтом ударной волны в пробке рассчитывались согласно [8], а параметры ВР — согласно [7].

Сравнение результатов моделирования (используются 175 процессоров, расстояние нормировано на $\lambda_{\rm H}$) с упрощенной теорией в момент времени 1271,85 $\lambda_{\rm H}/u$

	пол. фронта	пол. конц. пробки	гран. ВР в КНД	гран. ВР в КВД
упрощ. теория	-1201	-540	192	1904
моделир.	-1260 ± 50	-590 ± 50	140 ± 50	1960 ± 50

Заключение. Созданная программа параллельных вычислений, которая использует нестационарный метод статистического моделирования, позволяет моделировать процесс установления ударной волны в ударной трубе. Полученные результаты оригинальны и достоверны. При этом имеется возможность исследовать одновременно тонкие эффекты, связанные как с поступательной неравновесностью, так и с эффектами процесса тепломассопереноса. Увеличение числа процессоров до нескольких тысяч позволит моделировать процессы в реальных ударных трубах длиной в несколько метров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН "Математическое моделирование и интеллектуальные системы" (№ 16).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
- 2. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994.
- 3. Генич А.Р., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Сериков В.В., Яницкий В.Е. Приложение весовых схем статистического моделирования течений многокомпонентного газа к расчету структуры ударной волны // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1986. **26**, № 12. 1839–1854.
- 4. Genich A.P., Kulikov S.V., Manelis G.B., Chereshnev S.L. Thermophysics of translational relaxation in shock waves in gases // Sov. Tech. Rev. B. Therm. Phys. 1992. Vol. 4, Pt. 1. 1–69. (Рус. пер.: Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л. Поступательная релаксация в ударных волнах в газах. Препринт ИХФЧ АН СССР. Черноголовка, 1991).
- 5. Snir M., Otto S., Huss-Lederman S., Walker D., Dongarra J. MPI: The Complete Reference. Vol. 1. The MPI Core. Boston: MIT Press, 1998.
- 6. *Куликов С.В., Берзигияров П.К.* Статистическое моделирование поступательной неравновесности газовой смеси во фронте ударной волны на многопроцессорных компьютерах // Вычислительные методы и программирование. 2002. **3**, № 2. 51–56.
- 7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
- 8. Лосев С.А., Осилов А.И., Ступоченко Е.В. Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965.

Поступила в редакцию 09.04.2004