

УДК 519.6

Параллельный код для исследования дозвуковых потоков теплопроводной газовой смеси

Мустайкин М.С., Пескова Е.Е.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Аннотация: Исследование посвящено разработке параллельного кода на основе технологии MPI для численного исследования дозвуковых многокомпонентных газовых потоков в трубчатом реакторе. Математическая модель исследуемого процесса представляет собой уравнения Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха в цилиндрической системе координат. В настоящий момент в коде открыта возможность учета многокомпонентности смеси и процесса теплопроводности.

Ключевые слова: математическое моделирование, дозвуковые течения, многокомпонентная среда, уравнения Навье-Стокса, технология MPI.

Разработка вычислительных алгоритмов для моделирования дозвуковых газовых потоков с учетом внешних источников энергии и катализаторов представляет собой важную научно-практическую задачу [1–3]. Такие исследования позволяют прогнозировать поведение химически активных систем при варьировании управляющих параметров, что имеет ключевое значение для прикладных инженерных расчетов. Данные задачи являются трудоемкими из-за необходимости учета большого количества физико-химических процессов, что подводит к необходимости разработки специализированных вычислительных алгоритмов и их параллельной реализации.

Целью настоящей работы является разработка параллельного вычислительного алгоритма и 3D программ для решения задач дозвуковой динамикой химически активной многокомпонентной теплопроводной среды.

В предыдущих исследованиях авторы разработали основу параллельного вычислительного алгоритма для дозвуковых течений, пренебрегая многокомпонентностью среды, диффузией и теплопередачей [4]. В настоящей работе предложено расширение математической модели, учитывающее вклад теплопроводности и многокомпонентности, что позволяет более точно описывать процессы переноса энергии в рассматриваемых системах.

В основе параллельного алгоритма лежит принцип геометрической декомпозиции области, в основе вычислительного алгоритма – принцип расщепления по физическим процессам. Для этого на каждом шаге по времени в каждой подобласти решаются следующие задачи:

1. Вычисляются конвективные потоки с помощью потоков Русанова с модификацией стабилизирующего члена.
2. Вычисляются диссипативные потоки, отвечающие процессу теплопроводности, по схеме с центральными разностями.
3. Находятся величины энтальпии, плотности, температуры, концентрации компонент смеси, скорости без учета давления.
4. Находится давление посредством решения уравнения Пуассона методом Якоби. Проводится корректировка вектора скорости.

Вычислительный эксперимент проводился при следующих условиях: рассматривалась цилиндрическая труба, в которой в начальный момент времени покоится ме-

тан. Слева поступает смесь из метана и этилена (60% и 40% соответственно). Температура газа в начальный момент времени и температура втекающей смеси 873 К. Температура стенок 1373 К. Картина распределения массовой доли метана представлена на рис. 1. Видно, что в левой части трубы массовая доля метана составляет уже 60%. Картина изменения температуры представлена на рис 2. Газ уже полностью прогрелся от стенок, область пониженной температуры осталась лишь на входе.

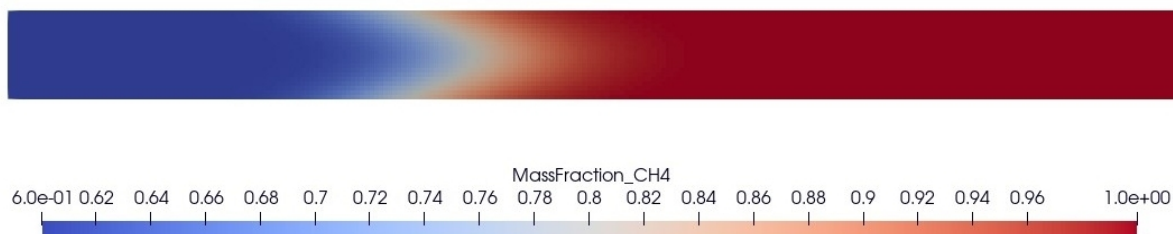


Рис. 1. Массовая доля метана

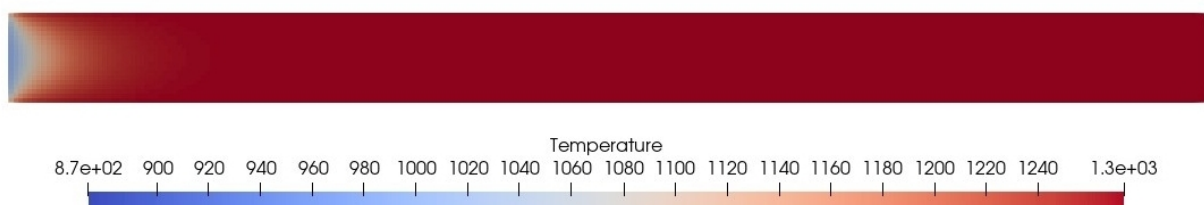


Рис. 2. Температура, К

Литература

1. Yakush S., Semenov O., Alexeev M. Premixed Propane-Air Flame Propagation in a Narrow Channel with Obstacles // *Energies*. 2023. Vol. 16. Art. 1516. DOI: 10.3390/en16031516.
2. Peskova E. E. Mathematical Modeling of Nonstationary Problems Related to Laser Thermochemistry of Methane in the Presence of Catalytic Nanoparticles // *Doklady Mathematics*. 2024. Vol. 109, no. 3. P. 256-261.
3. Пескова Е. Е., Снытников В. Н. Численное исследование конверсии метановых смесей под воздействием лазерного излучения // *Журнал Средневолжского математического общества*. 2023. Т. 25, № 3. С. 159-173.
4. Мустайкин М. С., Пескова Е. Е. Параллельный алгоритм для численного исследования дозвуковых реагирующих течений в цилиндрической системе координат // *Параллельные вычислительные технологии: XIX Всероссийская конференция с международным участием. Короткие статьи и описания плакатов*. С. 211-217.

MSC 65L20

Parallel code for studying subsonic flows of a thermally conductive gas mixture

M.S. Mustaykin, E.E. Peskova

National Research Mordovia State University

Abstract: The paper is devoted to the development of a parallel code based on MPI technology for the numerical study of subsonic multicomponent gas flows in a tubular reactor. The mathematical model of the process under study is the Navier-Stokes equations in the approximation of small Mach numbers in a cylindrical coordinate system. At the moment, the possibility of taking into account the multicomponent nature of the mixture and the process of thermal conductivity is open in the code.

Keywords: mathematical modeling, subsonic flows, multicomponent medium, Navier-Stokes equations, MPI technology.

References

1. Yakush S., Semenov O., Alexeev M. Premixed Propane-Air Flame Propagation in a Narrow Channel with Obstacles // *Energies*. 2023. Vol. 16. Art. 1516. DOI: 10.3390/en16031516.
2. Peskova E. E. Mathematical Modeling of Nonstationary Problems Related to Laser Thermochemistry of Methane in the Presence of Catalytic Nanoparticles // *Doklady Mathematics*. 2024. Vol. 109, no. 3. P. 256-261.
3. Peskova E. E., Snytnikov V. N. Chislennoe issledovanie konversii metanovykh smesei pod vozdeystviem lazernogo izlucheniya [Numerical study of methane mixtures conversion under laser radiation] // *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva* [Journal of Middle Volga Mathematical Society]. 2023. Vol. 25, no. 3. P. 159-173. (in Russian)
4. Mustaykin M. S., Peskova E. E. Parallelnyi algoritm dlya chislennogo issledovaniya dozvukovykh reagiruyushchikh techenii v tsilindricheskoi sisteme koordinat [Parallel algorithm for numerical study of subsonic reacting flows in cylindrical coordinate system] // *Parallelnye vychislitelnye tekhnologii: XIX Vserossiiskaya konferentsiya s mezhdunarodnym uchastiem. Kratkie statyi i opisaniya plakatov* [Parallel Computing Technologies: 19th All-Russian Conference with International Participation. Short papers and poster descriptions]. P. 211-217. (in Russian)