

УДК 004.94:534.222.2

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУМЕРНЫХ ДЕТОНАЦИОННЫХ ТЕЧЕНИЙ НА МНОГОПРОЦЕССОРНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКЕ

И. В. Семенов¹, П. С. Уткин¹, В. В. Марков²

Дается описание математических моделей и численных методов, которые используются авторами для моделирования на многопроцессорных кластерных системах двумерных течений с детонационными волнами. Выполнен анализ эффективности распараллеливания вычислительного алгоритма. Приводятся результаты вычислительных экспериментов по инициированию детонации в областях со сложной геометрией. Рассматриваемые задачи являются важными как с точки зрения фундаментальных проблем природы детонационных течений в газовых смесях, так и с точки зрения ряда практических приложений. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 05-08-50115а), гранта Президента РФ № МК-5068.2007.1 и Комплексной программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 14 “Фундаментальные проблемы информатики и информационных технологий”. Статья подготовлена по материалам доклада авторов на международной научной конференции “Параллельные вычислительные технологии” (ПаВТ-2008; <http://agora.guru.ru/pavt>).

1. Введение. Несмотря на то что явление газовой детонации имеет более чем вековую историю исследования (пионерские работы Чепмена и Жуге датируются 1899 и 1904 гг.), до сих пор природа многомерных детонационных структур, образующихся при различных начальных условиях в областях со сложной геометрией, является до конца не исследованной. В то же время, потребность в понимании подобных процессов велика при решении широкого класса прикладных задач, связанных с разработкой методов обеспечения взрывобезопасности на производствах, где возможны взрывы в трубопроводах, и с попытками использовать детонационное горение в силовых установках и в военных технологиях.

Исторически сложилось так, что натурный эксперимент в вопросах исследования газовой детонации долгое время являлся фактически единственным инструментом. Тем не менее результаты, полученные исследователями при использовании уже первых ЭВМ, помогли существенно прояснить природу детонационных явлений [1, 2], и сегодня вычислительный эксперимент — неотъемлемый этап исследования механики быстротекущих процессов [3]. Более того, современные многопроцессорные вычислительные комплексы позволяют выявить очень тонкие эффекты, обнаружить которые в натурном эксперименте без привлечения средств математического моделирования весьма затруднительно или практически невозможно.

В настоящей статье описаны математические модели, численные методы и алгоритмы распараллеливания, которые легли в основу разрабатываемого в Институте автоматизации проектирования РАН программного комплекса для расчета потоков реагирующих смесей, в частности детонационных течений на многопроцессорной вычислительной технике. Кроме того, представлены результаты вычислительных экспериментов по инициированию детонации в областях со сложной геометрией, связанных с оптимизацией геометрии камеры для сокращения времени и расстояния инициирования детонации и с детальным исследованием механизмов инициирования, реализующихся при различных геометриях камеры.

2. Разработка программного комплекса.

2.1. Математические модели течений реагирующих газовых смесей. Исследование проводится на базе системы уравнений, описывающей осесимметричные двумерные нестационарные течения невязкой сжимаемой многокомпонентной реагирующей газовой смеси, которая имеет следующий вид:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial r} + \frac{\partial G}{\partial z} = -\frac{H}{r} + S, \quad (1)$$

¹ Институт автоматизации проектирования РАН, ул. 2-ая Брестская, д. 19/18, 123056, Москва; e-mail: semenov@icad.org.ru, utkin@icad.org.ru

² Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, ул. Губкина, 8, 119991, Москва; e-mail: markov@mi.ras.ru

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \dots \\ \rho_N \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho_1 u \\ \dots \\ \rho_N u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p) u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho_1 v \\ \dots \\ \rho_N v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ (E + p) v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} \rho_1 u \\ \dots \\ \rho_N u \\ \rho u^2 \\ \rho uv \\ (E + p) u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} \dot{\omega}_1 \\ \dots \\ \dot{\omega}_N \\ 0 \\ 0 \\ \dot{q} \end{bmatrix}.$$

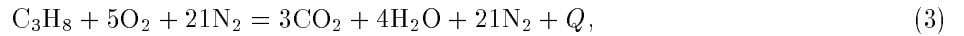
Здесь t — время; r и z — радиальная и продольная координаты; u и v — соответствующие составляющие скорости; ρ — суммарная плотность, p — давление, E — полная энергия газовой смеси; ρ_i , $\dot{\omega}_i$ — плотность и скорость изменения плотности i -го компонента смеси при химических реакциях; \dot{q} — тепловой эффект химических реакций; N — число компонентов смеси.

В качестве уравнений состояния смеси, рассматриваемой как совершенный газ, используются соотношения

$$p = \sum_{i=1}^N \rho_i \frac{R}{\mu_i} T, \quad E = \frac{\rho(u^2 + v^2)}{2} + \sum_{i=1}^N \rho_i e_i, \quad e_i = c_{V_i} T, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2)$$

где T — температура; R — универсальная газовая постоянная; e_i , c_{V_i} и μ_i — удельная внутренняя энергия, удельная теплоемкость при постоянном объеме и молярная масса i -го компонента смеси соответственно.

В рассматриваемых задачах в качестве реагирующей смеси используется пропано-воздушная смесь. Химические реакции моделируются одностадийной кинетикой горения пропана [4]:



где $Q = 46.6$ КДж/г — теплота сгорания пропана.

Таким образом, число компонентов N газовой смеси равно 5: C_3H_8 ($i = 1$), O_2 ($i = 2$), N_2 ($i = 3$), CO_2 ($i = 4$) и H_2O ($i = 5$). Скорость изменения плотности пропана определяется как

$$\dot{\omega}_1 = \mu_1 \dot{\omega}_1^{\text{мол}} = \mu_1 \left(k \frac{\rho_1}{\mu_1} \frac{\rho_2}{\mu_2} \right), \quad (4)$$

где $k = -7 \times 10^{14} p^{-0.2264} \exp(-E^*/RT)$ см³/моль · с, $E^* = 190.3$ КДж/моль, $\dot{\omega}_1^{\text{мол}}$ — скорость изменения молярной концентрации первого компонента смеси — пропана, p — давление в атмосферах и T — температура в градусах Кельвина. Скорости изменения плотностей остальных компонентов смеси определяются через $\dot{\omega}_1^{\text{мол}}$ и стехиометрические коэффициенты в реакции (3):

$$\dot{\omega}_2 = 5\mu_2 \dot{\omega}_1^{\text{мол}}, \quad \dot{\omega}_3 = 0, \quad \dot{\omega}_4 = -3\mu_4 \dot{\omega}_1^{\text{мол}}, \quad \dot{\omega}_5 = -4\mu_5 \dot{\omega}_1^{\text{мол}}. \quad (5)$$

Тепловой эффект химической реакции определяется как

$$\dot{q} = -Q \dot{\omega}_1. \quad (6)$$

2.2. Численные методы расчета течений с волнами детонации. Для решения задачи (1), (2), (4)–(6) используется метод расщепления по физическим процессам. Сначала решается система уравнений газовой динамики (1) без учета члена \mathbf{S} в правой части. Затем полученное решение корректируется с учетом источниковых членов, связанных с протекающими химическими реакциями. Без такого подхода при совместном решении системы потребовалось бы значительно уменьшать шаг расчета по времени, так как используется явная схема интегрирования по времени, а система уравнений химической кинетики является жесткой.

Для дискретизации системы уравнений газовой динамики по пространственным переменным используется метод конечных объемов (МКО). Основными преимуществами класса подобных схем являются их вычислительная робастность и консервативность, а также возможность проведения расчетов на неструктурированных сетках [5]. Используется так называемая центрированная схема МКО, когда конечные объемы совпадают с ячейками расчетной сетки. Интегрирование по времени осуществляется с помощью явной схемы Эйлера первого порядка аппроксимации. Таким образом, на первом этапе схема для решения системы уравнений газовой динамики может быть записана в виде

$$\mathbf{U}_m^{\text{газ}} = \mathbf{U}_m^n - \Delta t \left(\frac{1}{S_m} \sum_{\sigma=1}^K l_{\sigma} f_{\sigma} + \frac{\mathbf{H}_m}{r_m} \right), \quad (7)$$

где пространственный индекс m пробегает все ячейки расчетной сетки; n — временной индекс; S_m — площадь m -й ячейки; $\Delta t = (t_{n+1} - t_n)$ — шаг интегрирования по времени; K — количество ячеек, имеющих общую грань (в двумерном случае ребро) с m -й ячейкой; l_σ — длина общей грани σ ; f_σ — поток через общую грань σ ; H_m — источниковый член, обусловленный осевой симметрией задачи; r_m — расстояние от оси симметрии до центра m -й ячейки. Потоки вычисляются на основе точного решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва методом типа Годунова–Колгана второго порядка аппроксимации по пространственным переменным на гладких решениях [6, 7]. Второй порядок аппроксимации достигается за счет кусочно-линейного восполнения искомым функций в расчетных ячейках. Значения газодинамических параметров экстраполируются из центров расчетных ячеек на грани с применением ограничителя `minmod`. Шаг интегрирования по времени Δt определяется динамически в процессе вычислений для выполнения условия устойчивости [6].

На следующем этапе производится учет источниковых членов в правой части (1), обусловленных химическими реакциями:

$$\frac{d\mathbf{U}_m^{\text{хим}}}{dt} = \mathbf{S}, \quad t \in [t_n; t_{n+1}], \quad \mathbf{U}_m^{\text{хим}}(t_n) = \mathbf{U}_m^{\text{газ}}. \quad (8)$$

Здесь t_n — время на n -м шаге интегрирования.

В качестве начального условия для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (8) берется решение, полученное на предыдущем газодинамическом этапе. В [8] дается обзор методов для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) химической кинетики. В настоящей работе для решения системы ОДУ используется многошаговый неявный метод Гира. Построенное решение, взятое в момент времени t_{n+1} , и будет решением всей задачи на следующем шаге по времени: $\mathbf{U}_m^{n+1} = \mathbf{U}_m^{\text{хим}}(t_{n+1})$. При расчетах используются структурированные сетки [6] с четырехугольными ячейками. Число ячеек вдоль координатных направлений x и y обозначим через N_x и N_y соответственно.

2.3. Анализ эффективности распараллеливания вычислительного алгоритма. Моделирование быстропротекающих физико-химических процессов взрывного характера — удачный пример того, как применение многопроцессорных систем может не просто сократить время расчетов, но и сделать вычислительный эксперимент полноценным инструментом исследования. Прежде всего, это связано с тем, что подобные задачи являются очень затратными с вычислительной точки зрения. Приходится решать многомерные задачи газовой динамики совместно с уравнениями химической кинетики и с применением детальных расчетных сеток, поскольку пространственный масштаб осреднения играет крайне важную роль в вопросах исследования детонационных процессов, которые требуют разрешать в пространстве тонкие зоны химических превращений и области кумуляции.

2.3.1. Метод распараллеливания. Как известно, одним из самых эффективных методов распараллеливания вычислительных алгоритмов решения задач математической физики, основанных на использовании явных схем интегрирования по времени, является метод декомпозиции расчетной области, когда все расчетные ячейки распределяются поровну между процессорами [9, 10]. Особенно удобен этот метод при использовании структурированных расчетных сеток, так как в этом случае области ячеек, принадлежащих тому или иному процессору, можно определить набором индексов этих ячеек вдоль каждого из координатных направлений. В работе используется одномерный метод декомпозиции, когда вся расчетная область разбивается поровну между процессорами вдоль координатного направления y (рис. 1а). Оценим целесообразность данного подхода для распараллеливания расчетного алгоритма с учетом специфики рассматриваемых задач и используемой вычислительной техники.

Пусть для параллельного расчета используется N_p процессоров. С точки зрения особенностей распараллеливания, задачи о распространении ударных волн (УВ) в узких каналах, заполненных реагирующей смесью, характеризуются, во-первых, тем, что длина канала на порядок превышает его ширину, а во-вторых, наличием выделенного направления распространения лидирующей ударной волны (ЛУВ), например вдоль оси абсцисс (рис. 1). За фронтом ЛУВ происходит повышение температуры, что может приводить к интенсивному протеканию химических реакций. С вычислительной точки зрения это приводит к тому, что в соответствующих ячейках увеличивается время расчета за счет решения уравнений химической кинетики (8). Измерения, выполненные в процессе решения рассматриваемых задач, показывают, что время расчета параметров в одной такой ячейке может увеличиваться до двух раз, и возникает необходимость балансировки загрузки процессоров. Декомпозиция вдоль направления распространения ЛУВ обеспечивает балансировку загрузки процессоров (рис. 1а), поскольку в область расчета каждого из N_p процессоров попадают ячейки как из областей, в которых интенсивно протекают химические реакции (на рис. 1 они закрашены серым цветом), так и из областей, в которых реакций нет (в силу направления распространения ЛУВ). Однако при данном способе декомпозиции количество обме-

нов между процессорами максимально, поскольку, как уже отмечалось, длина канала на порядок больше его ширины, а количество межпроцессорных обменов пропорционально длине границы между областями, обрабатываемыми различными процессорами. На каждом шаге по времени количество граничных ячеек областей, которые обрабатываются процессорами независимо, пропорционально N_x . При использовании декомпозиции вдоль направления x количество обменов меньше — количество граничных ячеек пропорционально N_y , однако нетрудно видеть, что при этом будет происходить разбалансировка нагрузки (рис. 1б), поскольку на разных процессорах решение уравнений химической кинетики будет занимать разное время.

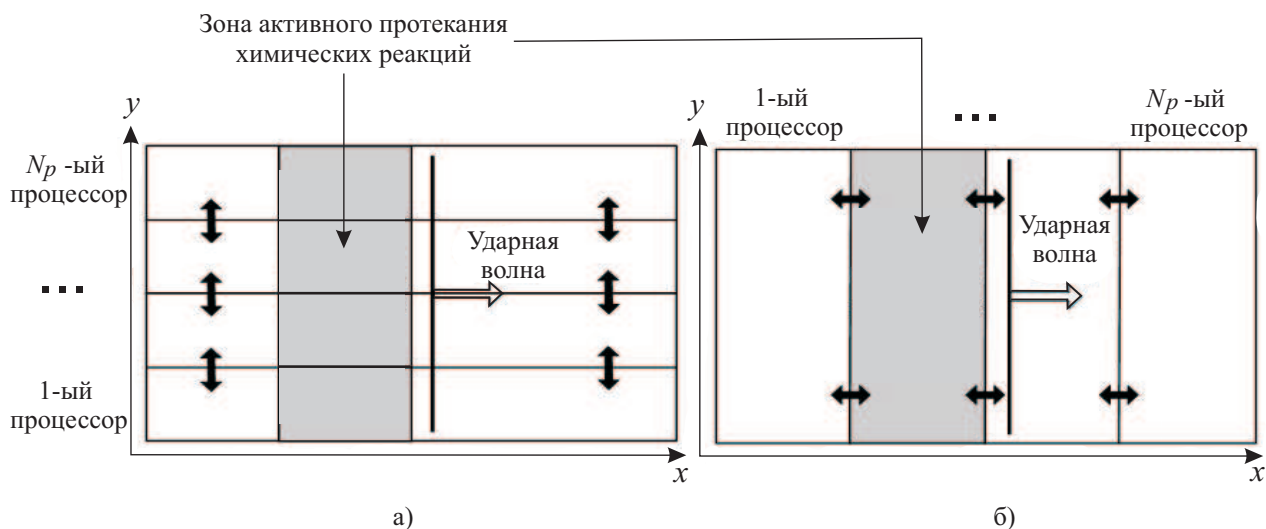


Рис. 1. Различные способы декомпозиции расчетной области. Сплошными двусторонними стрелками обозначены межпроцессорные обмены

Принять решение о том, какой из способов декомпозиции предпочтительнее в каждой конкретной ситуации, помогает анализ параметров задачи и характеристик используемых для расчетов суперкомпьютеров (СК).

2.3.2. Используемые вычислительные ресурсы. Для проведения расчетов используются многопроцессорные вычислительные комплексы Института автоматизации проектирования РАН и Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (МСЦ РАН). Основная часть расчетов проводилась на установленном в МСЦ РАН суперкомпьютере МВС-6000IM (256 процессоров Intel Itanium 2, работающих на частоте 1.6 ГГц; пиковая производительность 1.64 TFLOPS). Анализ эффективности вычислительного комплекса на этом СК приведен в работе [11]. Весной 2007 г. МСЦ РАН предоставил пользователям возможность применять для своих расчетов новый СК МВС-100k. В состав СК МВС-100k входят 160 вычислительных модулей (ВМ), каждый из которых представляет собой сервер, содержащий два четырехъядерных процессора Intel Xeon (всего 1280 вычислительных ядер). Пиковая производительность этого СК составляет порядка 15 TFLOPS.

Для оценки основных характеристик коммуникационной среды СК МВС-100k была выполнена серия измерений по benchmark-программам [12]. Сетевое решение на основе высокоскоростной коммуникационной среды Infiniband демонстрирует очень высокую скорость двунаправленных обменов между двумя ВМ с использованием библиотеки MPI — порядка 1500 Мбайт/с. Латентность сети, т.е. время передачи сообщения нулевого размера, изменяется от 3 до 5 мкс в зависимости от удаленности ВМ. Для сравнения, аналогичная скорость обменов на СК МВС-6000IM составляет около 500 Мбайт/с.

2.3.3. Измерение ускорения и эффективности распараллеливания на тестовой задаче. Анализируя характеристики коммуникационной среды СК МВС-100k, отметим высокую скорость передачи данных. Фактически, качество коммуникационной среды гораздо больше влияет на быстродействие СК, чем вычислительная мощность процессоров. Отличительная характеристика рассматриваемых задач — высокая вычислительная трудоемкость. Другими словами, время работы СК, которое тратится на расчет параметров в ячейках, гораздо больше времени обмена данными между ВМ. В данной ситуации более выгоден первый вариант декомпозиции расчетной области (рис. 1а), поскольку время простоя системы, вызванное разбалансировкой нагрузки из-за различного объема фактических вычислений, приходящихся на один процессор, значительно превосходит время обмена данными между ВМ.

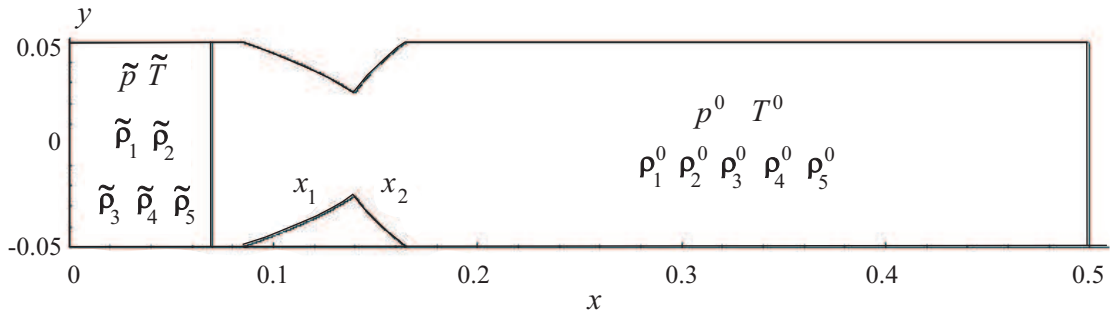


Рис. 2. Геометрия области для тестовой задачи. Все размеры указаны в метрах

Для получения количественных оценок ускорения и эффективности распараллеливания вычислительного алгоритма на СК МВС-100к, в качестве примера, рассмотрим задачу о распространении УВ в круглой трубе с параболическим профилем стенок (рис. 2). Более подробно постановка задачи описана в разделе 3.2. Размеры расчетной области составляют $N_x = 3566$ и $N_y = 200$ ячеек. Значения начальных параметров в рабочей камере (с верхним индексом 0), а также геометрические характеристики x_1 и x_2 совпадают с приведенными в разделе 3.2. Параметры в камере высокого давления обеспечивают начальную УВ с числом Маха 2.83: $\tilde{p} = 51$ атм, $\tilde{T} = 1063$ К, $\tilde{\rho}_1 = \tilde{\rho}_4 = \tilde{\rho}_5 = 0$ г/см³, $\tilde{\rho}_2 = 3.47 \times 10^{-3}$ г/см³, $\tilde{\rho}_3 = 13.02 \times 10^{-3}$ г/см³.

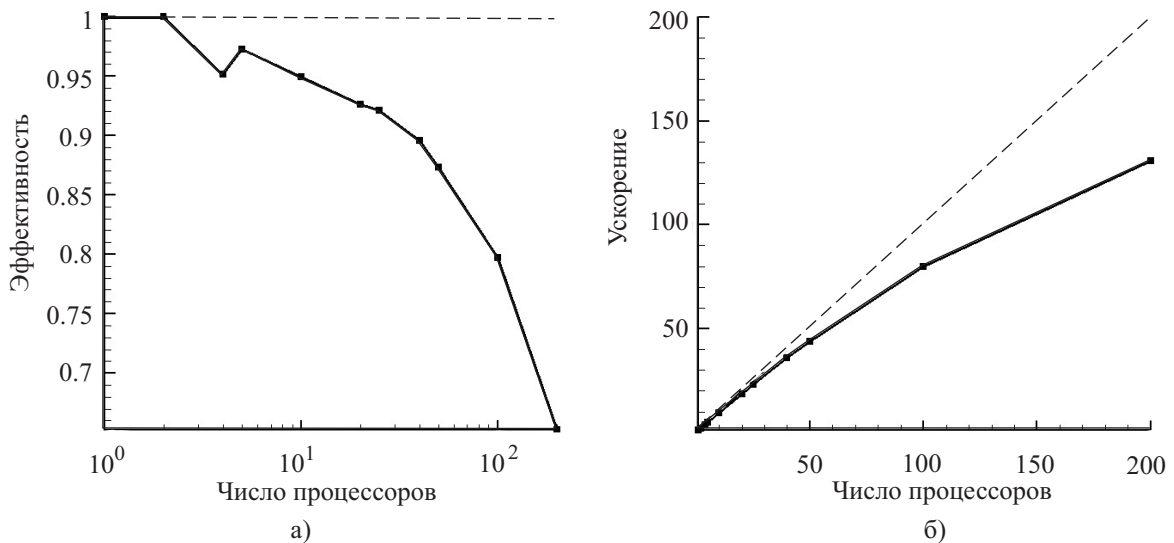


Рис. 3. Зависимости эффективности и ускорения от количества процессоров. Пунктирными линиями обозначены идеальные эффективность и ускорение

Расчет данной задачи производился на N_p процессорах при $N_p = 1, 2, 4, 5, 10, 20, 25, 40, 50, 100$ и 200. На рис. 3 приведены результаты в виде графиков зависимостей ускорения (отношения времени работы N_p процессоров ко времени работы одного процессора) и эффективности (отношения ускорения при данном количестве процессоров к числу процессоров) от количества процессоров.

Анализ приведенных графиков показывает, что даже при использовании 100 процессоров ускорение достигает 80, а эффективность 0.8 соответственно. При использовании максимально возможного при данном способе декомпозиции количества процессоров, равного 200, т.е. когда на процессор приходится один слой расчетных ячеек, поскольку $N_y = 200$, эффективность достигает величины 0.65. Одним из неформальных критериев целесообразности использования того или иного числа процессоров является величина эффективности 0.5. Если говорить в абсолютном выражении затраченного на расчеты времени, то, например, при использовании 100 процессоров время расчета одного шага составляет 0.07 с, а время работы всего программного комплекса (до момента прохождения ЛУВ всей трубы) — около 80 мин. Для сравнения, время расчета одного шага на одном процессоре составляет 5.6 с, а время всего расчета — около двух суток.

3. Вычислительные эксперименты.

3.1. История исследования. Согласно классическим экспериментальным результатам Я. Б. Зельдовича, Р. И. Солоухина, К. И. Щелкина и др. (см., например, [13]), относящимся к середине прошлого века, переход горения в детонацию (ПГД) в гладких трубах, заполненных реагирующей смесью, для широкого класса углеводородных топлив может осуществляться на расстояниях порядка нескольких десятков калибров трубы. Однако в работах К. И. Щелкина [14] было показано, что наличие дополнительных турбулизаторов в трубе, например так называемой спирали Щелкина, может приводить к существенному сокращению времени и расстояния ПГД. Следствием турбулизации течения является изменение профиля пламени и увеличение его поверхности, что в свою очередь приводит к интенсификации процессов диффузии и теплопроводности, которыми обуславливается процесс распространения пламени. Подобный способ инициирования детонации получил название метода классического ПГД. Этот метод требует минимальных затрат энергии на начальное инициирование горения и, тем не менее, значительных расстояний и времен для ПГД.

Для сокращения времени и расстояния ПГД без дополнительных энергозатрат предлагается использовать специальные профили стенок трубы, которые дают возможность управлять локальными областями газодинамических фокусировок потока таким образом, чтобы обеспечить условия, необходимые, во-первых, для самовоспламенения топливно-воздушной смеси и, во-вторых, для формирования детонационного режима [15–17].

3.2. Постановка задачи. Рассматривается осесимметричная труба, заполненная стехиометрической пропано-воздушной смесью, состоящая из трех секций — камеры высокого давления постоянного сечения, участка специального профиля и выходной части постоянного сечения. Параметры в камере высокого давления, заполненной инертной смесью кислорода с азотом, подбираются таким образом, чтобы получить относительно слабую УВ заданной интенсивности в диапазоне значений чисел Маха от 2.0 до 3.0 (скорости УВ от 670 м/с до 1000 м/с). Имеющиеся экспериментальные данные [18] позволяют трактовать эту волну как формирующуюся перед волной горения после прохождения пламенем, инициированным слабым источником, участка трубы с установленной спиралью Щелкина. Таким образом, речь идет об оптимизации геометрии, так называемых, преддетонаторов, которые сокращают время и расстояние перехода горения в детонацию. Поскольку в начальный момент времени в трубе уже имеется слабая УВ, корректнее говорить не о переходе горения в детонацию, а о переходе ударной волны в детонационную (ПУВД).

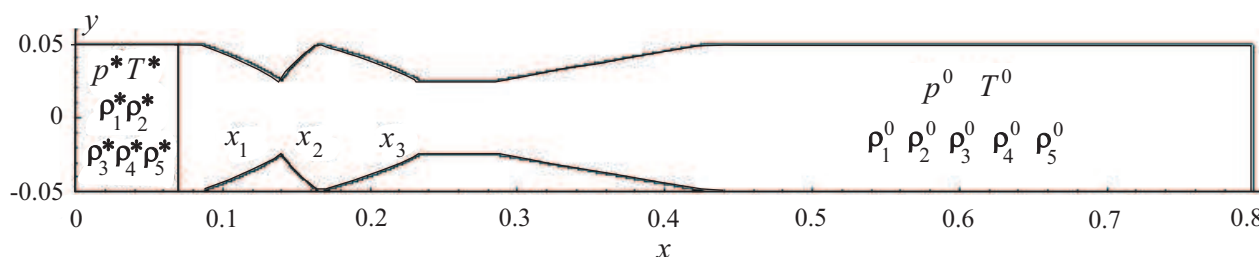


Рис. 4. Геометрия трубы, обеспечивающая ПУВД для числа Маха 2.3 инициирующей УВ. Все размеры указаны в метрах

Вычислительные эксперименты [17] показывают, что при уменьшении интенсивности инициирующей УВ для получения ПУВД требуется усложнить профиль стенок трубы за счет введения нескольких однотипных элементов. Минимальное число Маха инициирующей УВ, для которого удалось получить ПУВД с использованием двух таких элементов параболической формы в трубе с внутренним диаметром 10 см, равно 2.3 (скорость УВ примерно 770 м/с). При этом наиболее ярко проявляются основные механизмы инициирования, обусловленные взаимодействием инициирующей УВ с элементами конструкции различной формы. Поэтому рассмотрим детально именно этот случай. На рис. 4 схематично изображено продольное сечение трубы. Слева расположена камера высокого давления длиной 7 см, газодинамические параметры внутри камеры обозначены верхним индексом * и задаются следующим образом: $p^* = 26$ атм, $T^* = 794$ К, $\rho_1^* = \rho_4^* = \rho_5^* = 0$ г/см³, $\rho_2^* = 2.34 \times 10^{-3}$ г/см³ и $\rho_3^* = 8.94 \times 10^{-3}$ г/см³.

Газодинамические параметры в основной камере обозначены на рис. 4 верхним индексом 0 и имеют следующие значения: $p^0 = 1$ атм, $T^0 = 298$ К, $\rho_1^0 = 6.56 \times 10^{-5}$ г/см³, $\rho_2^0 = 2.38 \times 10^{-4}$ г/см³, $\rho_3^0 = 8.96 \times 10^{-4}$ г/см³ и $\rho_4^0 = \rho_5^0 = 0$ г/см³.

В начальный момент времени на границе камеры высокого давления в результате распада разрыва образуется плоская УВ.

Профиль трубы, составленный из параболических и прямолинейных участков, задается следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} x_1 &= -29.54 y^2 + 0.16, \\ x_2 &= 13.54 y^2 + 0.13, \quad \text{при } -0.05 \leq y \leq -0.025, \quad 0.025 \leq y \leq 0.05 \\ x_3 &= -36.58 y^2 + 0.26. \end{aligned}$$

Длина узкой части диаметром 5 см после участка трубы с параболическим профилем составляет 5.2 см, угол раствора конического расширения — 20 градусов.

На основе большого количества вычислительных экспериментов был подобран характерный размер ячейки расчетной сетки, необходимый для пространственного разрешения особенностей детонационных течений — зон химических реакций, областей кумуляции и зон взаимодействия потока с профилированными стенками. Особенно это важно при достаточно низких числах Маха инициирующей УВ, когда для ПУВД используются сложные профили, состоящие из нескольких элементов, и необходимо четко различать влияние каждого из них. Для исследования ПУВД при числе Маха 2.3 используется сетка с количеством ячеек порядка 7.2 млн и характерным размером ячейки 0.05 мм.

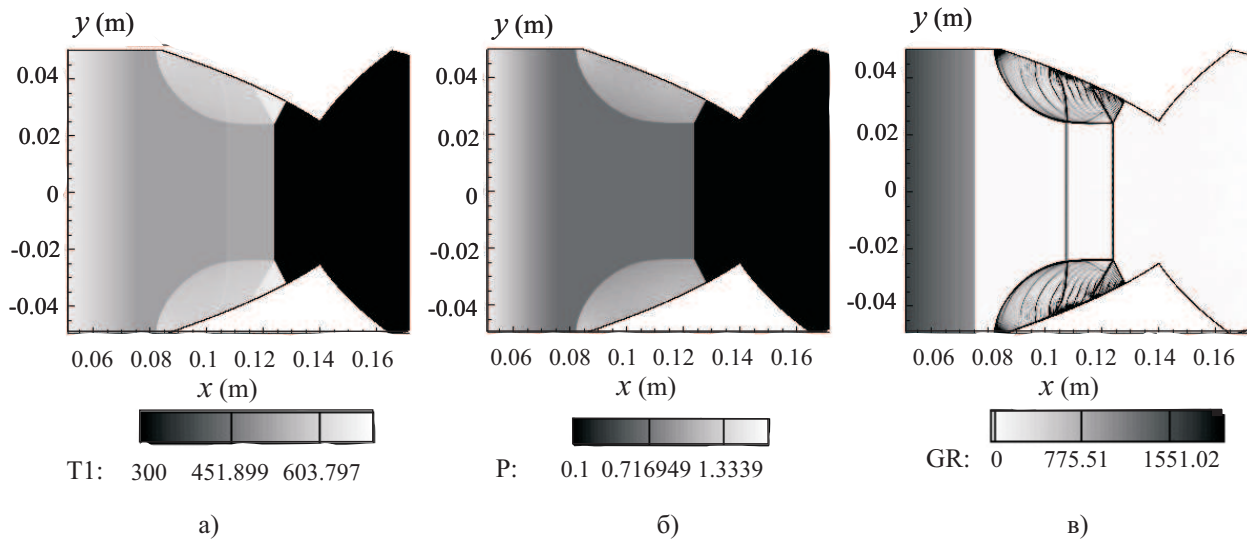


Рис. 5. Маховское отражение УВ от первого параболического изгиба профиля трубы в момент времени 70 мкс, отсчитываемого от момента образования ЛУВ: а) поле температур, б) поле давления, в) шпирен-визуализация. Здесь и далее шкала температур — в градусах Кельвина, давления — в МПа, градиента плотности — в г/см⁴

3.3. Результаты вычислительного эксперимента. Плоская УВ, образующаяся в результате распада разрыва на границе камеры высокого давления, набегают на параболическую поверхность, которая определяется кривой x_1 . Оптимизация формы этой части трубы для получения газодинамической фокусировки потока в непосредственной близости от фронта лидирующей УВ для плоского канала и диапазона чисел Маха инициирующей УВ вблизи 3.0 проводилась ранее в [15]. В результате взаимодействия УВ с искривленной поверхностью трубы возникает нерегулярное отражение с образованием ножки Маха, которая играет важную роль в формировании первой области фокусировки в силу повышенных значений температуры и давления за ножкой Маха (рис. 5а, рис. 5б). Для визуализации волновой картины течения используется так называемая численная шпирен-визуализация модуля градиента плотности газа, которая позволяет четко различать скачки плотности, соответствующие газодинамическим разрывам (рис. 5в). Этот метод является численным аналогом оптического метода Теплера регистрации волновых картин в экспериментах.

В результате дифракции ударных волн на профилированной стенке происходит усиление ЛУВ вблизи оси симметрии трубы. Для чисел Маха инициирующей УВ от 2.83 (этому случаю соответствует постановка тестовой задачи в разделе 2.3.3) до 3.0 происходит не просто усиление, а образование так называемого “детонационного пузыря”, т.е. в небольшом объеме газа у оси симметрии трубы возникает детонация. Анализ развития детонационного процесса в данном случае проведен в [17]. Гораздо сложнее обстоит дело, когда детонация в области первой фокусировки не возникает. В этом случае необходимо

использовать второй профилированный элемент, на который, однако, приходит уже не плоская волна, а волна с искривленным фронтом. Было предпринято исследование зависимости формы передней части второго элемента профиля трубы, обеспечивающего инициирование детонации, от кривизны набегающей УВ. При числе Маха инициирующей УВ 2.3 вторую фокусировку, которая привела к возникновению “детонационного пузыря”, удалось получить, когда форма передней части второго элемента профиля описывалась кривой x_3 . Второй параболический элемент более “вытянут” по сравнению с первым.

Оптимальная профилировка второго элемента, с одной стороны, обеспечивает мощную фокусировку потока, и чем “круче” профиль — тем сильнее фокусировка. С другой стороны, для инициирования детонации должно выполняться еще одно важное требование. Отраженные от второго элемента ударные волны должны сфокусироваться в непосредственной близости от фронта ЛУВ в зоне непрореагировавшей смеси, что происходит при более “пологом” профиле. Только баланс этих двух факторов за счет выбора оптимальной формы передней части второго элемента может обеспечить инициирование детонации. На используемой разностной сетке при вторичной фокусировке отраженных от профилированной стенки волн удалось получить тонкую структуру расходящейся цилиндрической детонации (рис. 6). На рис. 6а представлен еще один наглядный способ визуализации детонационных структур, дающий картины, сходные с наблюдаемыми в экспериментах. Речь идет о так называемых следовых снимках, которые получают в экспериментах с помощью закопченной фольги или специальных пластин, расположенных на стенках камеры. Тройные точки маховских конфигураций, распространяющихся вдоль фронта детонационной волны (ДВ), вычерчивают на закопченной фольге или пластине четкие следы, которые образуют картину детонационных ячеек (рис. 6а). Для получения аналогичной картины в вычислительных экспериментах необходимо в каждой расчетной ячейке запоминать максимальное давление за все время расчета.

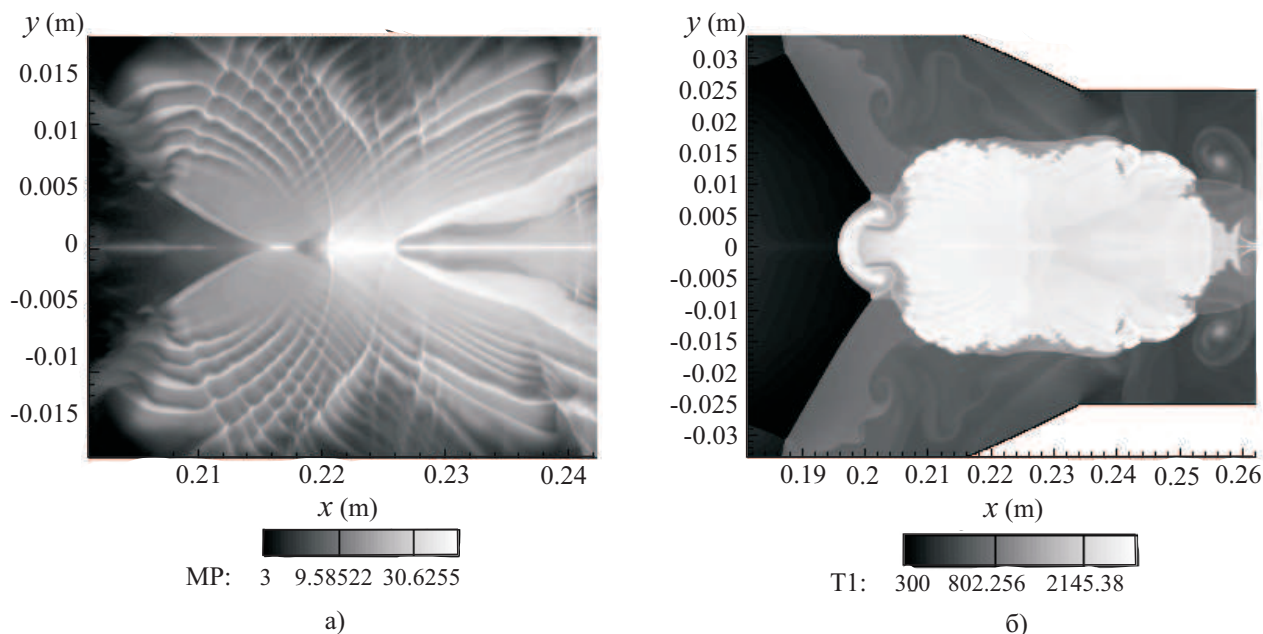


Рис. 6. Расходящаяся цилиндрическая детонация в момент времени 240 мкс, отсчитываемого от момента образования ЛУВ: а) поле максимумов давления, б) поле температур

Следующим принципиально важным элементом конструкции является участок трубы вдвое меньшего диаметра по сравнению с основным сечением. Расходящаяся цилиндрическая ДВ разрушается, и узкий участок трубы необходим для восстановления детонации за счет формирования мощных поперечных волн (рис. 7а), которые в свою очередь и определяют устойчивость ДВ, выходящей в расширяющуюся коническую часть трубы (рис. 7б). Вычислительные эксперименты показали, что крайне важным параметром является длина узкого участка трубы. С одной стороны, чем длиннее этот участок, тем более устойчивая ДВ должна в нем сформироваться, а задача перепуска установившейся ДВ из узкого канала в широкий достаточно хорошо изучена [19]. Тем не менее оказалось, что детонация, возникающая в узкой части трубы, является существенно нестационарной и сильно пересжатой, поэтому классические результаты для установившейся ДВ в данном случае не позволяют правильно объяснить процесс. Выявлено, что для обеспечения перепуска пересжатой детонации из узкой трубы в широкую длина сужения, а также угол раствора конуса не должны превышать некоторых критических величин для заданной интенсивно-

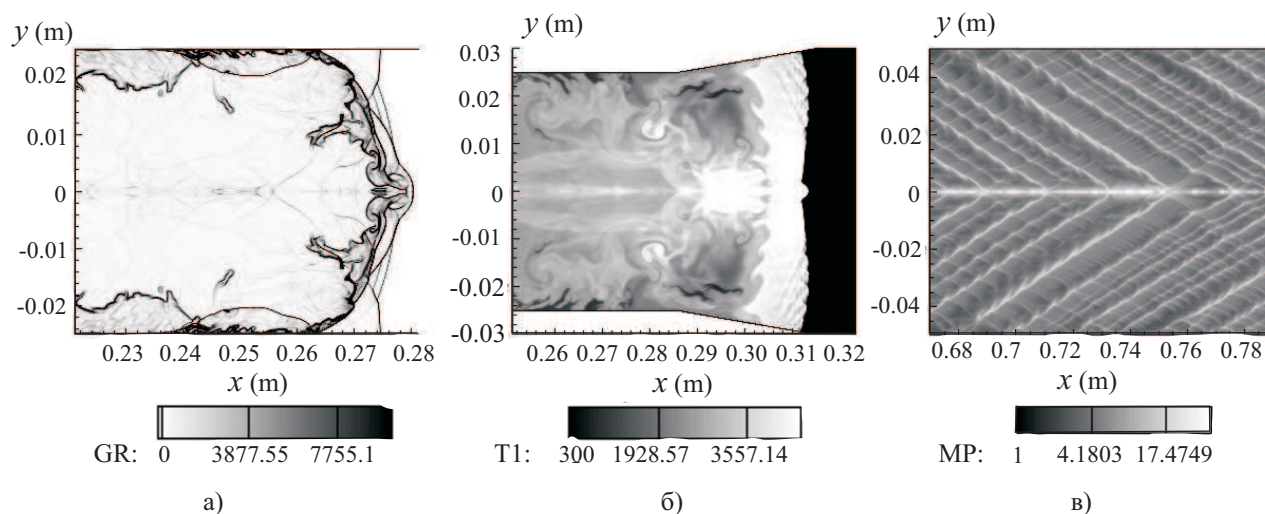


Рис. 7. Развитие детонационного процесса: а) в узкой части трубы — шlierен-визуализация в момент времени 250 мкс, отсчитываемого от момента образования ЛУВ; б) в коническом расширении — поле температур в момент времени 270 мкс; в) в выходной секции трубы — поле максимумов давления в момент времени 510 мкс

сти инициирующей УВ. Кроме того, переходу ДВ в широкую часть трубы способствует ситуация, когда пересжатая ДВ формируется непосредственно в выходном сечении узкой части трубы. На рис. 7в представлена характерная структура детонационных ячеек, которая получается в выходной части трубы, что свидетельствует о реализации самоподдерживающегося режима распространения ДВ.

4. Заключение. В работе представлены математические модели, численные алгоритмы, а также методы распараллеливания, которые использовались при создании комплекса программ для решения широкого класса задач динамики реагирующих течений на многопроцессорных вычислительных комплексах с распределенной памятью. Проведен анализ эффективности распараллеливания расчетного алгоритма на тестовой задаче. Предложен способ декомпозиции расчетной области, обеспечивающий высокие показатели ускорения и эффективности на современных суперкомпьютерах терафлопной производительности для рассматриваемого класса задач, решение которых характеризуется большой вычислительной трудоемкостью.

С помощью разработанного комплекса программ решена задача о профилировании поверхности трубы для сокращения длины и времени перехода ударной волны в детонационную. Выявлены формы элементов конструкции трубы, обеспечивающих возникновение детонации. Проанализирована роль каждого элемента трубы в процессе формирования самоподдерживающейся детонации.

Полученные результаты позволяют говорить о новом способе получения детонации и, соответственно, о новом направлении в развитии теории детонации. Это направление возникло благодаря современным возможностям проведения численного эксперимента с использованием многопроцессорных ЭВМ. Очевидно, что решить проблему оптимального профилирования невозможно экспериментально, а только лишь путем численного моделирования, в результате которого есть возможность анализа всех деталей процесса формирования детонации и раскрытия механизмов, способствующих созданию благоприятных условий для самовоспламенения и образования локальных детонационных структур, приводящих к реализации самоподдерживающегося режима детонационного горения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Марков В.В. Численное моделирование образования многофронтной структуры детонационной волны // Докл. Акад. Наук СССР. 1981. 258, № 2. 314–317.
2. Sedov L.I., Korobeinikov V.P., Markov V.V. The theory of propagation of blast waves // Proc. of the Steklov Institute of Mathematics. 1988. 2. 187–228.
3. Современные проблемы исследования быстротекающих процессов и явлений катастрофического характера / Под. ред. О.М. Белоцерковского, И.В. Семенова, В.В. Маркова. М.: Наука, 2007.
4. Frolov S.M., Aksenov V.S., Shamshin I.O. Detonation propagation through U-bends // Nonequilibrium Processes. 2005. 1. 348–364.

5. *Barth T., Ohlberger M.* Finite volume methods: foundation and analysis // Encyclopedia of Computational Mechanics. 2004. 1. 439–470.
6. *Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
7. *Колган В.П.* Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных течений газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. 1972. **3**, № 6. 68–77.
8. *Оран Э., Борис Дж.* Численное моделирование реагирующих потоков. М.: Мир, 1990.
9. *Dongarra J., Foster I., Fox G., Gropp W., Kennedy K., Torczon L., White A.* Sourcebook of parallel computing. New York: Morgan Kaufmann Publishers, 2003.
10. *Немнюгин С.А., Стесик О.Л.* Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем. СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
11. *Семенов И.В., Ахмедьянов И.Ф., Уткин П.С.* Разработка вычислительного комплекса для решения двух- и трехмерных задач газодинамики реагирующих течений на многопроцессорных ЭВМ // Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах. Материалы VI Международного научно-практического семинара. Т. 2. СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского ун-та, 2007. 138–145.
12. Система тестов производительности для параллельных компьютеров (<http://parallel.ru/testmpi/>).
13. *Солоузин Р.И.* Детонационные волны в газах // Успехи физических наук. 1963. **LXXX**, вып. 4. 525–552.
14. *Щелкин К.И.* Неустойчивость горения и детонации газов // Успехи физических наук. 1965. **87**, вып. 2. 273–302.
15. *Semenov I., Frolov S., Markov V., Utkin P.* Shock-to-detonation transition in tubes with shaped obstacles // Pulsed and Continuous Detonations. Moscow: Torus Press Ltd, 2006. 159–169.
16. *Фролов С.М., Семенов И.В., Комиссаров П.В., Уткин П.С., Марков В.В.* Сокращение длины и времени перехода горения в детонацию в трубе с профилированными регулярными препятствиями // Докл. РАН. 2007. **415**, № 4. 1–5.
17. *Семенов И.В., Уткин П.С., Марков В.В.* Иницирование детонации в профилированных трубах // Тезисы докладов Всероссийской конференции “Проблемы механики сплошных сред и физики взрыва”, посвященной 50-летию Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН. Новосибирск, 2007. 151.
18. *Фролов С.М., Аксенов В.С., Басевич В.Я.* Сокращение преддетонационного участка в капельной взрывчатой смеси комбинированными средствами // Докл. РАН. 2005. **401**, № 2. 1–4.
19. *Roy G.D., Frolov S.M., Borisov A.A., Netzer D.W.* Pulse detonation propulsion: challenges, current status, and future perspective // Progress in Energy and Combustion Science. 2004. **30**. 545–672.

Поступила в редакцию
30.03.2008
