Моделирование нестационарных двухфазных потоков в каналах с использованием параллельных вычислений

Перепечко Ю.В.[1,2], Киреев С.Е.[1,3], Сорокин К.В.[1,2], Имомназаров Ш.Х.[1,2,3]

[1] Институт горного дела им. Н.А. Чинакала СО РАН

[2] Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН

[3] Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

г. Новосибирск

Работа поддержана грантом РНФ 17-77-20049

Цель

Моделирование нестационарных неизотермических течений дисперсных смесей вязких сжимаемых жидкостей в присутствии примеси

Решение геологических и технологических задач:

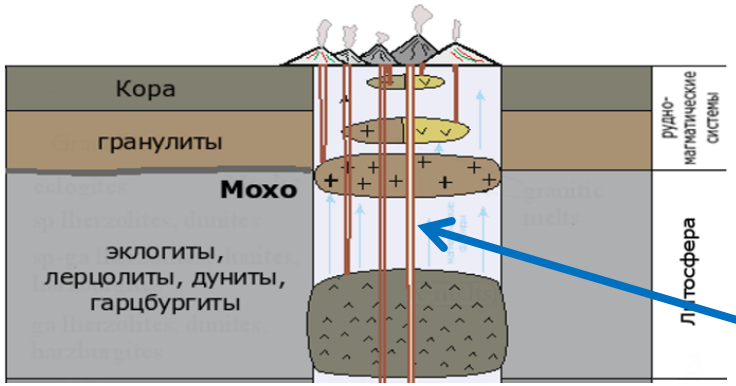
- Флюидо-магматический поток в верхних слоях земли
- Течение технологических смесей
- Поток гранулированной насыщенной смеси в гражданской инженерии

Приложения

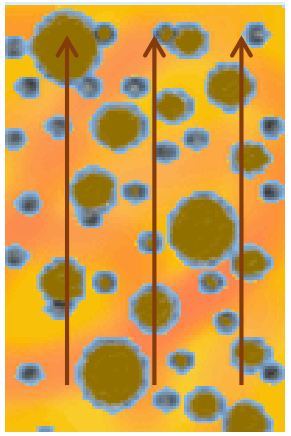
Природные процессы

Технологические процессы

Флюидные системы литосферы

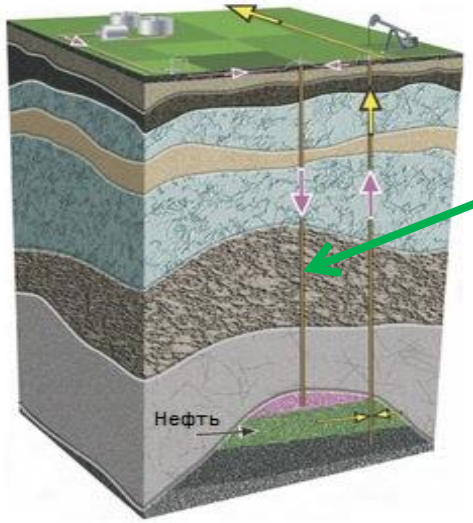


Напорное Течение

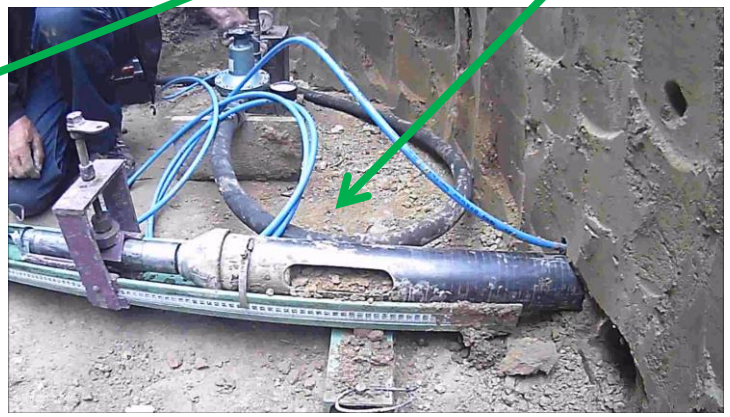


+ примесь

Добыча и транспортировка нефтегазового сырья



Бестраншейная прокладка коммуникаций

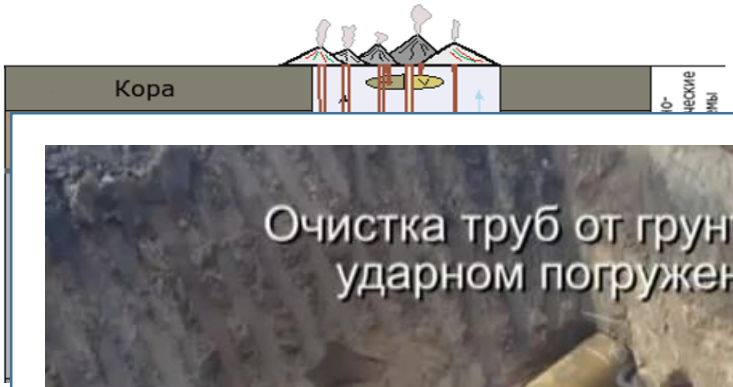


Приложения

Природные процессы

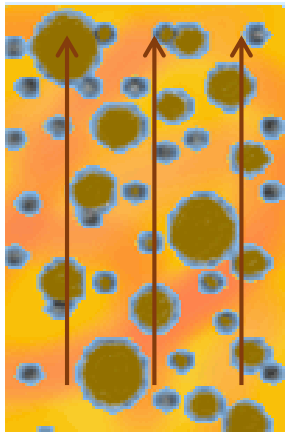
Технологические процессы

Флюидные системы литосферы



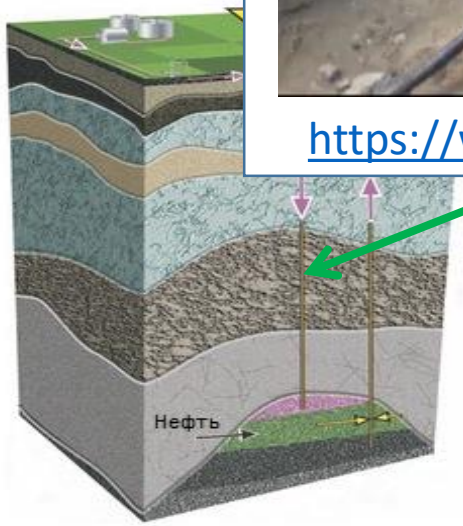
https://www.youtube.com/watch?v=CaJooAEAfI0

Напорное Течение



+ примесь

Добыча и тра
нефтегазо



Термодинамически согласованная модель

Метод законов сохранения:

- первое и второе начала термодинамики
- законы сохранения массы, импульса, энергии, энтропии
- инвариантность относительно преобразования Галилея

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$
$$\frac{\partial j_i}{\partial t} + \partial_k \Pi_{ik} = 0$$
$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{F} = 0$$

$$\vec{j} = \vec{j}_0 + \rho \vec{u}_2,\ \vec{F} = \vec{F}_0 + S\vec{u}_2,\ E = E_0 + \frac{\rho \vec{u}_2}{2} + (\vec{u}_2, \vec{j}_0)$$
$$\Pi_{ik} = \Pi_{0,ik} + \rho u_{2,i} u_{2,k} + u_{2,i} j_{0,k} + u_{2,k} j_{0,i}$$
$$\vec{Q} = \vec{Q}_0 + \left(\frac{\rho \vec{u}_2}{2} + (\vec{u}_2, \vec{j}_0) + E_0 \right) \vec{u}_2 + \frac{\vec{u}_2}{2} \vec{j}_0 + (\Pi_0, \vec{u}_2)$$

$$\frac{\partial \vec{u}_2}{\partial t} + (\vec{u}_2, \nabla)\vec{u}_2 = \alpha \nabla \mu + \beta \nabla T$$

$$dE_0 = T dS + \mu d\rho + (\vec{u}_1 - \vec{u}_2, d\vec{j}_0)$$

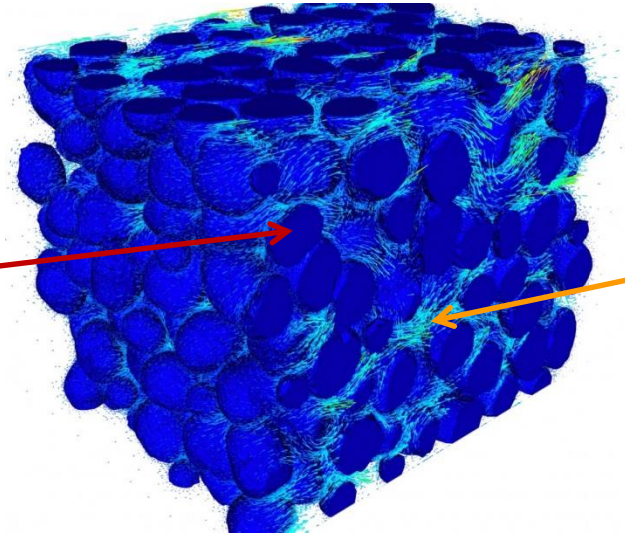
Ландау (1941)
Халатников (1965)

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{Q} = 0$$

Двухфазная среда

Фаза 1

$\vec{u}_1, \rho_1, J, \eta_1, c_1$



Фаза 2

$\vec{u}_2, \rho_2, \eta_2, c_2$

T, S, κ, D

Roberts, Loper (1987)
Доровский (1987)

$$dE_0 = TdS + \mu d\rho + \mu_\alpha d\rho_\alpha + \varsigma\sigma dJ + (\vec{u}_1 - \vec{u}_2, d\vec{J}_0)$$

Система термодинамических уравнений

закон сохранения массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0$$

сохранение количества капель 1-й фазы

$$\frac{\partial J}{\partial t} + \operatorname{div}(J\mathbf{u_1}) = 0$$

закон сохранения массы для примеси

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(c_1\rho_1\mathbf{u_1} + c_2\rho_2\mathbf{u_2} + \mathbf{L}_\alpha) = 0$$

закон сохранения полного импульса

$$\frac{\partial j_i}{\partial t} + \partial_k(\rho_1 u_{1i}u_{1k} + \rho_2 u_{2i}u_{2k} + P\delta_{ik} - (\eta_1 + \eta_{12})u_{1ik} - (\eta_2 + \eta_{12})u_{2ik}) = \rho\mathbf{g}$$

уравнение движения 2-й фазы

$$\frac{\partial u_{2i}}{\partial t} + (\mathbf{u_2}, \nabla)u_{2i} = -\frac{1}{\rho}\partial_i P + \varsigma\frac{J}{\rho}\partial_i\sigma + \frac{\rho_1}{2\rho}\partial_i(\mathbf{u_1} - \mathbf{u_2})^2 - \\ - \frac{1}{\rho_2}b(j_i - \rho u_{1i}) + \frac{1}{\rho_2}\partial_k(\eta_2 u_{2ik} + \eta_{12}u_{1ik}) + g_i$$

уравнение на энтропию

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div}\left(S_1\mathbf{u_1} + S_2\mathbf{u_2} + \frac{\mathbf{L}_q}{T} - \frac{\mu_\alpha\mathbf{L}_\alpha}{T}\right) = \frac{R}{T}$$

Система термодинамических уравнений

производство энтропии

$$R = \frac{1}{\rho_2} b(j_i - \rho u_{1i})^2 + \kappa \left(\frac{\nabla T}{T}\right)^2 + 2\nu \nabla \left(\frac{\mu_\alpha}{T}\right) \nabla T + DT^2 \left(\nabla \left(\frac{\mu_\alpha}{T}\right)\right)^2 + \\ + \frac{1}{2}\eta_1 \partial_k u_{1i} + \frac{1}{2}\eta_2 \partial_k u_{2i} + \eta_{12} \partial_k u_{1i} \partial_k u_{2i}$$

$$u_{1ik} = \partial_k u_{1i} + \partial_i u_{1k} - \frac{2}{3}\delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{u_1}$$

$$u_{2ik} = \partial_k u_{2i} + \partial_i u_{2k} - \frac{2}{3}\delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{u_2}$$

$$\mathbf{L}_q = -\kappa \frac{1}{T} \nabla T - \nu T \nabla \left(\frac{\mu_\alpha}{T}\right)$$

$$\mathbf{L}_\alpha = -\nu \frac{1}{T} \nabla T - DT \nabla \left(\frac{\mu_\alpha}{T}\right)$$

уравнения состояния

$$\delta\rho = \rho\alpha\delta p - p\beta\delta T$$

$$\delta s = \frac{c_p}{T}\delta T - \frac{1}{\rho}\beta\delta p$$

поверхностное натяжение

$$\sigma = \sigma_0 \frac{(T_c - T)}{(T_c - T_{ref})} - a_2 \ln(1 + a_3 c)$$

химический потенциал примеси

$$\mu_\alpha = d_1 P + d_2 T + \bar{R} T \ln(c)$$

Вычислительный алгоритм

Метод контрольного объема

Дискретные аналоги содержат **точное интегральное сохранение** таких величин, как **масса, количество движения и энергия** на **любой группе контрольных объемов**

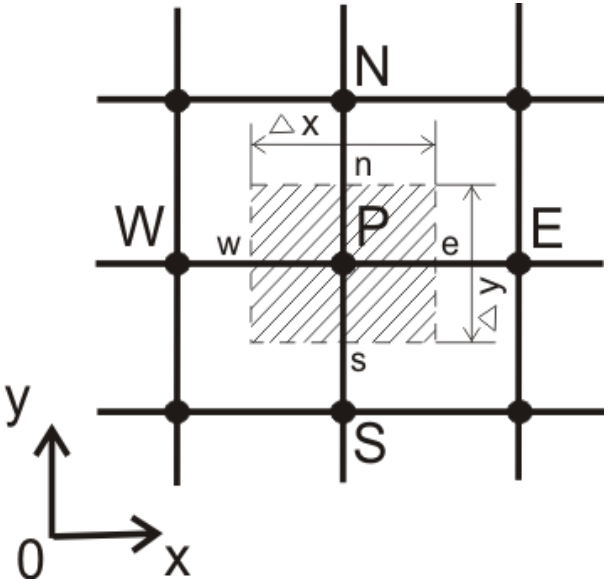
Уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_y}{\partial y} = 0$$

$$\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \rho}{\partial t} dt dy dx + \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial \rho u_x}{\partial x} dx dy dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial \rho u_y}{\partial y} dy dx dt = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{(\rho_p - \rho_p^0)\Delta x \Delta y}{\Delta t} + ((\rho u_x)_e - (\rho u_x)_w)\Delta y + ((\rho u_y)_n - (\rho u_y)_s)\Delta x = 0$$

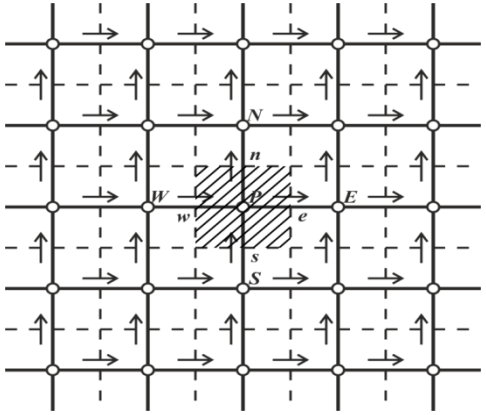


Самарский (1971)
Патанкар (1984)

Особенности построения алгоритма

- Выполнение законов сохранения на любых объемах
- Полностью неявная схема по времени: возможность счета на различных временных масштабах
- **Схемы аппроксимации конвективных слагаемых : против потока первого порядка / HLPA (Hybrid Linear/Parabolic Approximation, Zho, 1991) второй порядок точности, удовлетворяет критерию CBC (convection boundedness criterion)**
- **Центральноразностная схема аппроксимации диффузионных слагаемых**
- **Процедура IPSA (inter-phase-slip algorithm, Spalding, 1980): расчет согласованных с полем давления полей скоростей фаз**
- Учет сжимаемости фаз в рамках процедуры IPSA
- **Сдвинутая равномерная сетка :**

Решатели СЛАУ:
МПН
BiCGStab (PETSc)



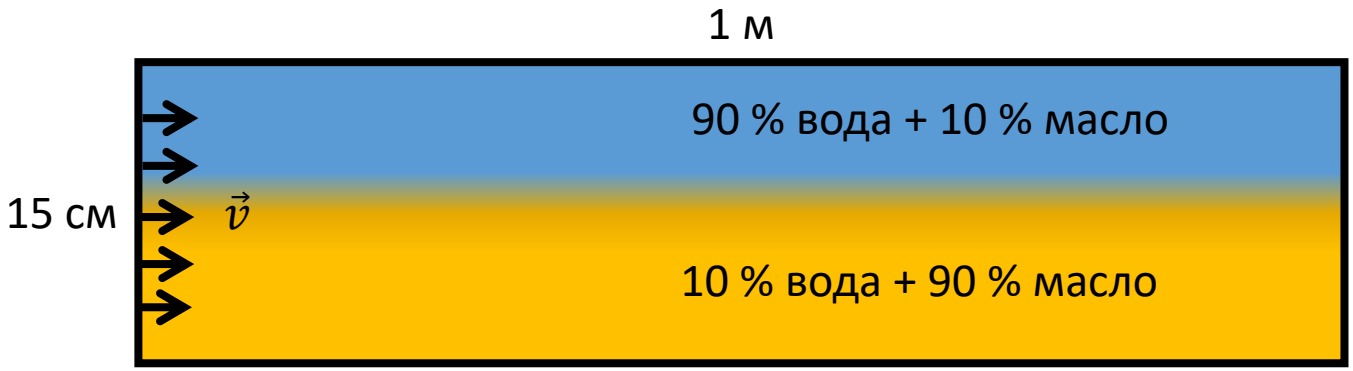
○ **- давление, плотность и энтропия определяются в узловых точках основной сетки**

→ **- точки определения составляющей скорости в направлении** x

↑ **- точки определения составляющей скорости в направлении** y

Пример расчета

- Моделирование напорного течения дисперсной смеси



Расчетные параметры

Обезразмеривание на : u_{20}

$$k = 10^{-3}\ (\text{м}^2)$$
$$\eta_1 = 10^{-3}\ (\text{Па}\cdot\text{с})$$
$$\eta_2 = 10^{-1}\ (\text{Па}\cdot\text{с})$$

$D = 2\cdot 10^{-9}\ (\text{м}^2/\text{с})$
$T_c = 300\ (\text{К})$
$a_1 = 7\cdot 10^{-2}\ (\text{Н/м})$
$a_3 = 1$
$10^{-6} \le a_2 \le 3.5\ (\text{Н/м})$

$d_1 = 1E-01\ (\text{м}^3/\text{кг})$
$d_2 = 1E-03\ (\text{м}^2/\text{К}\cdot\text{с}^2)$
$R = 8.3144\ (\text{Дж/моль}\cdot\text{К})$
$\lambda_1 = 10^{-6}$
$\lambda_2 = 10^{-2}\ (\text{кг/м}\cdot\text{с}^2\cdot\text{К})$

Физические параметры

вода + масло

$$P_0 = 10^5\,(\text{Па}),\ T_0 = 293\,(\text{К}) \Rightarrow \rho_{20} = 999,\ \rho_{10} = 880\,(\text{кг}/\text{м}^3)$$

$$\alpha_{T2}^{ph} = 4.7\cdot 10^{-9},\ \alpha_{T1}^{ph} = 1.2\cdot 10^{-10} \quad (\text{Па}^{-1})$$

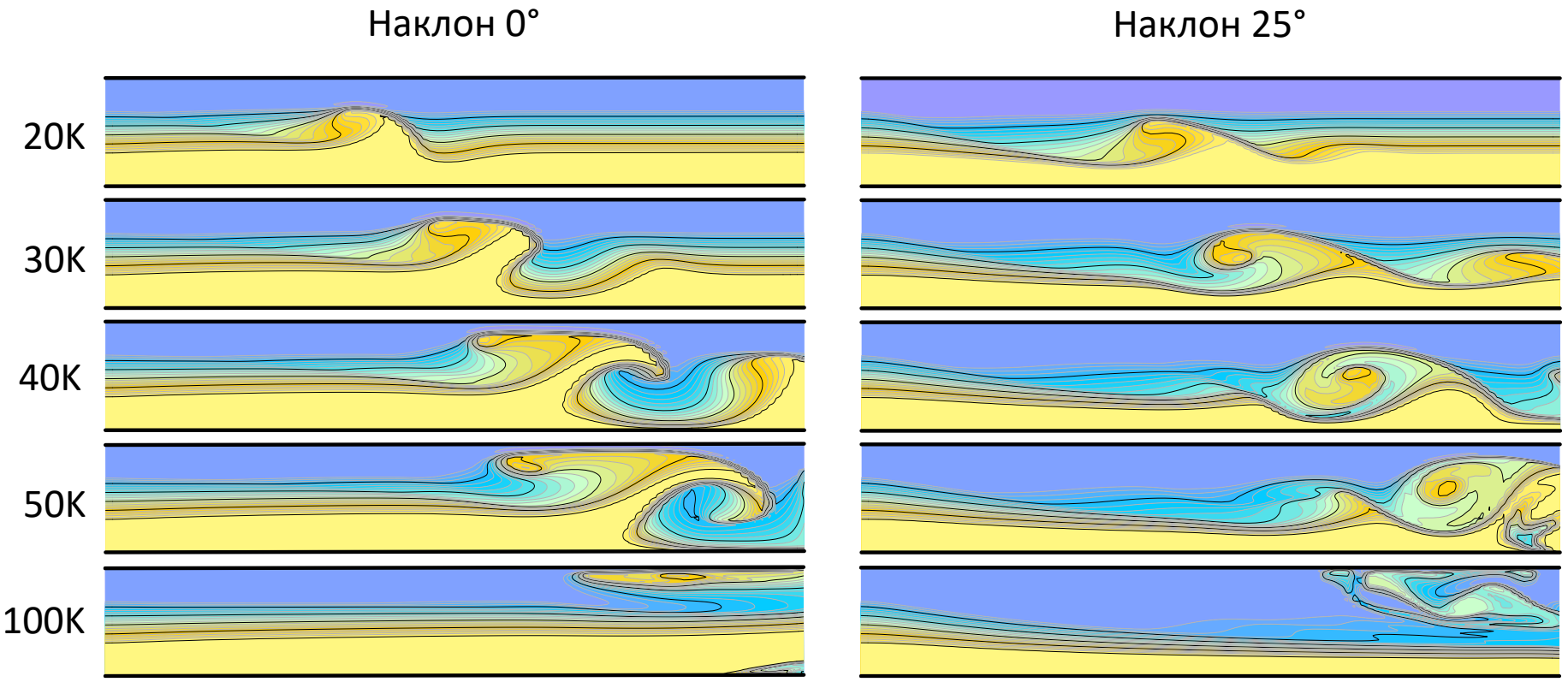
$$\beta_{P2}^{ph} = 9.97\cdot 10^{-5},\ \beta_{P1}^{ph} = 9.2\cdot 10^{-4} \quad (\text{К}^{-1})$$

$$c_{P2}^{ph} = 4.21\cdot 10^3,\ c_{P1}^{ph} = 1.9\cdot 10^3 \quad (\text{Дж}/\text{кг}\cdot\text{К})$$

$$\chi = 1.34E-07\,(м^2/с)$$

Пример расчета

Течение в наклонном канале в поле тяжести



Распределение плотности фазы 2 (масло)

Пример расчета

Верхний вдув жидкой фазы 2 в двухфазный поток в канале в поле тяжести

Без горизонтального потока

С горизонтальным потоком

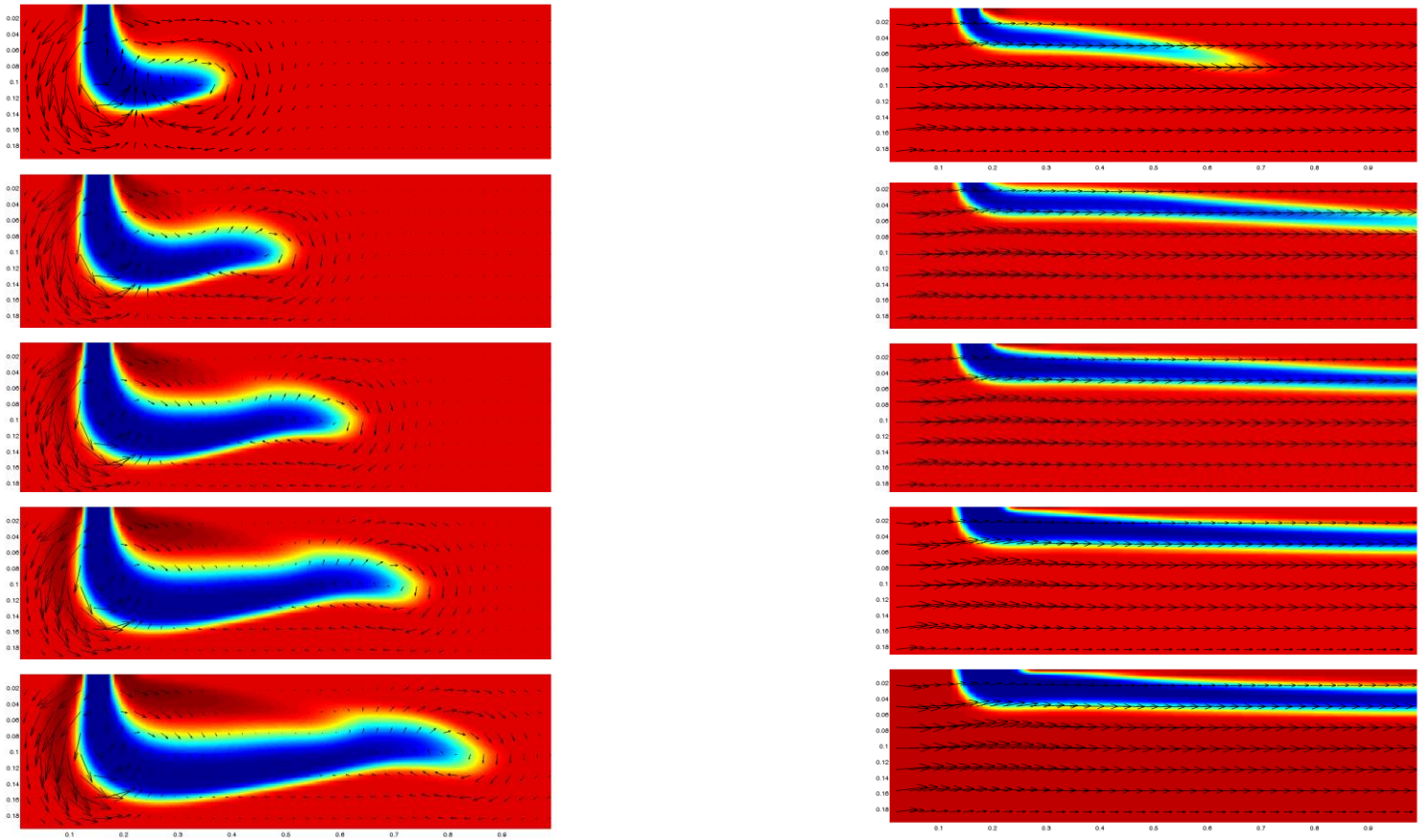
10K

15K

20K

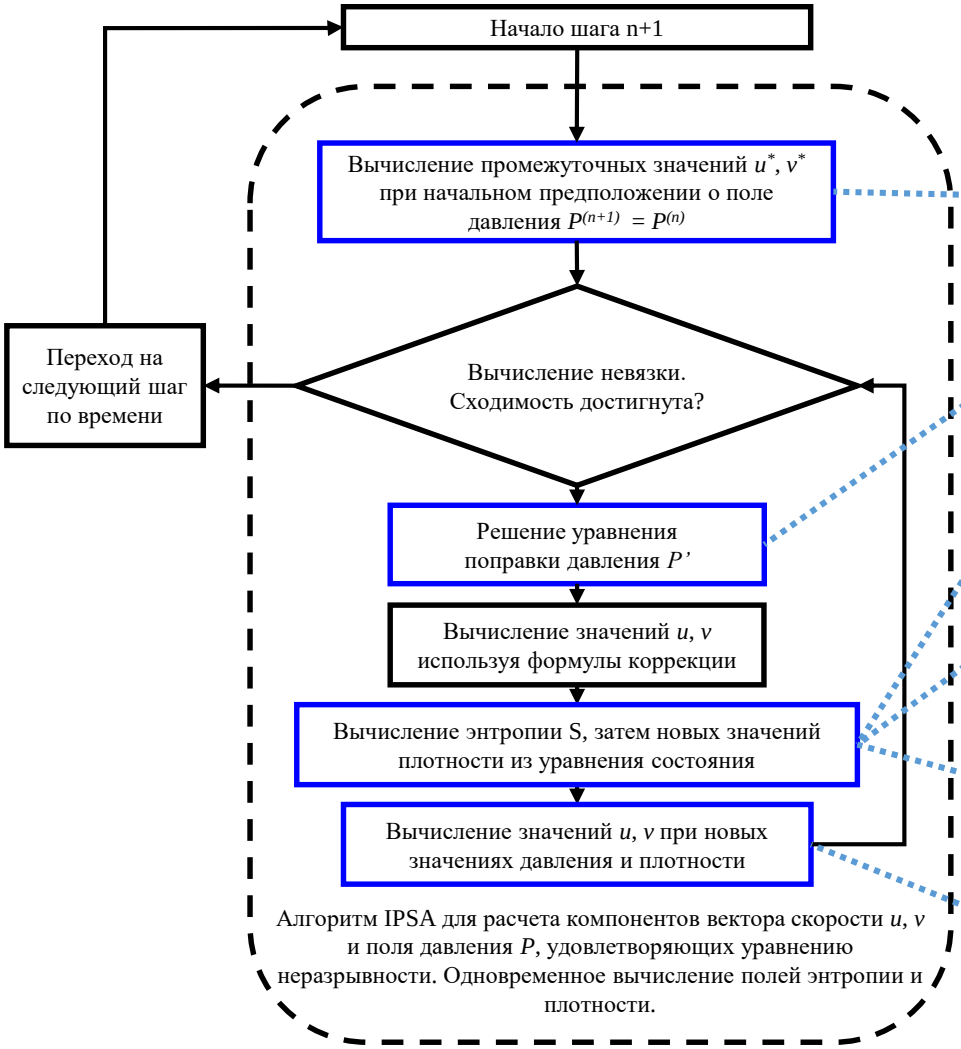
25K

30K



Распределение плотности фазы 2 и поле скорости (почва)

Схема численного алгоритма



Решение уравнений движения

Решение уравнения поправки давления

Решение уравнения для энтропии

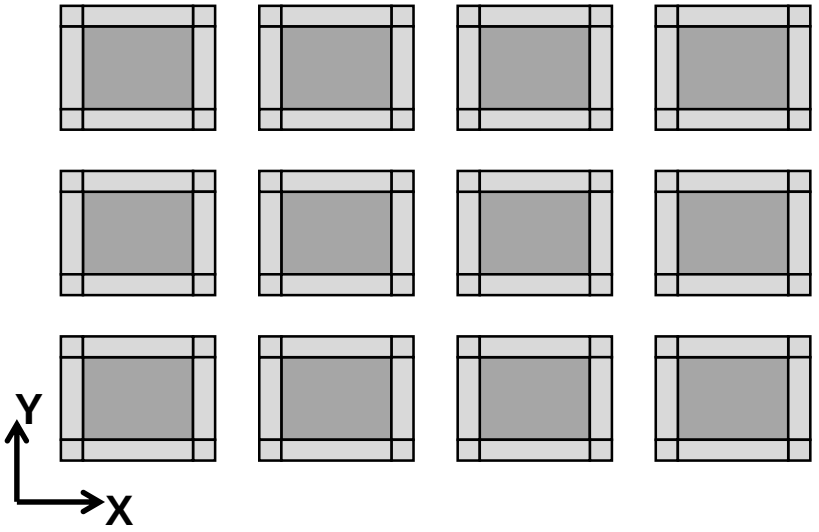
Решение уравнения переноса для концентрации примеси

Решение уравнения переноса для количества капель 1-й фазы

Решение уравнений движения

Параллельная реализация

- Декомпозиция пространства моделирования
  - 2D декомпозиция
    с перекрытием
    в 2 ячейки

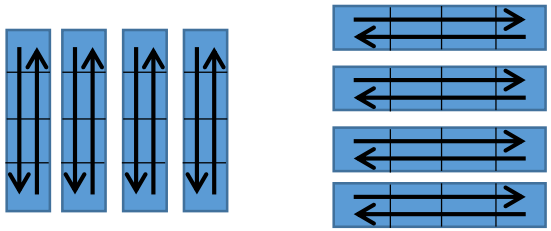


- Средства:
  - Fortran + MPI
  - Библиотека PETSc

Параллельная реализация

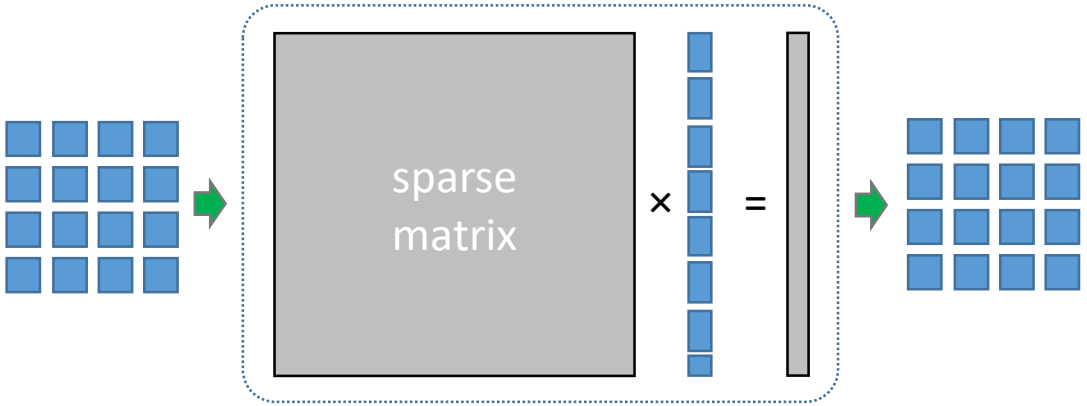
- **Использованные решатели СЛАУ:**

Метод переменных направлений (МПН)
ручная реализация



Множество независимых прогонок по одному направлению

BiCGStab
библиотека PETSc



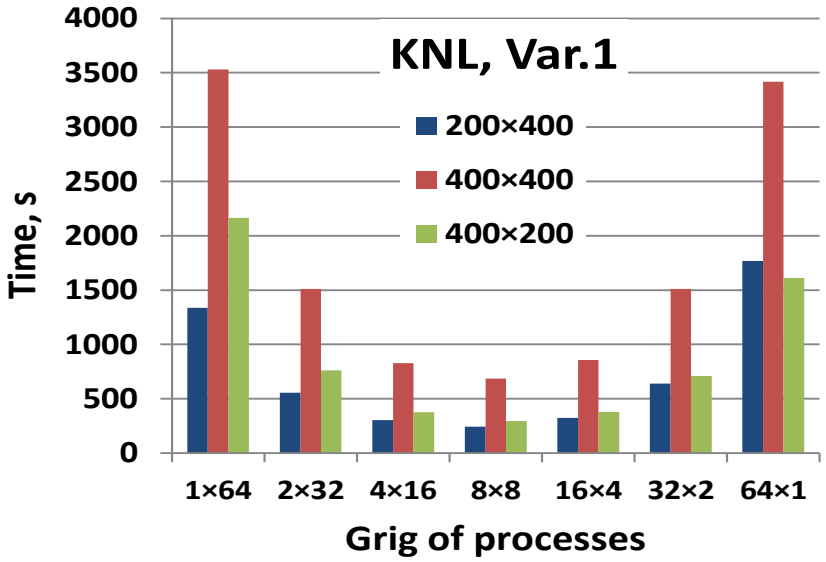
Перераспределение данных для решателя

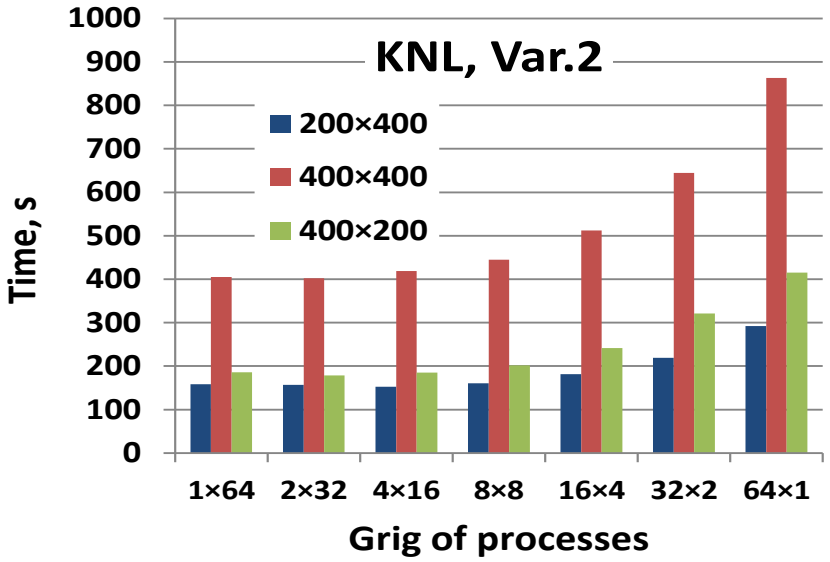
- **Варианты реализации для сравнения:**
  - Вариант 1: МПН + BiCGStab (PETSc)
    - МПН – решение уравнений движения, переноса
    - BiCGStab – решение уравнения поправки давления
  - Вариант 2: BiCGStab (PETSc)
    - BiCGStab – решение всех уравнений

Вычислительные системы

- Кластер МВС-10П «SandyBridge»
  - 2 × 8-core Intel Xeon E5-2690 2.9 GHz
    (16 ядер на узел, 2 потока на ядро)
  - 64 GB RAM
  - 2 × Intel MIC (не использовались)
- Кластер НКС-1П «KNL»
  - 1 × 72-core Intel Xeon Phi 7290 1.5 GHz
    (72 ядер на узел, 4 потока на ядро)
  - 96 GB RAM, 16 GB MCDRAM
- Кластер НКС-1П «Broadwell»
  - 2 × 16-core Intel Xeon E5-2697Av4 2.6 GHz
    (32 ядра на узел, 2 потока на ядро)
  - 128 GB RAM

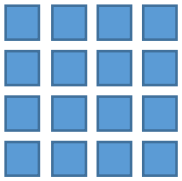
- Сравнение способов декомпозиции области (параметров решетки MPI-процессов)
  - 1 узел KNL, 64 процесса, 10 шагов





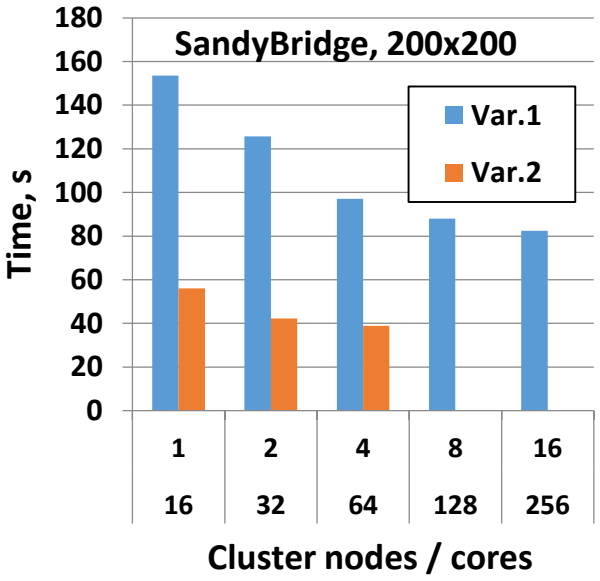
- Вывод: оптимальная декомпозиция области:

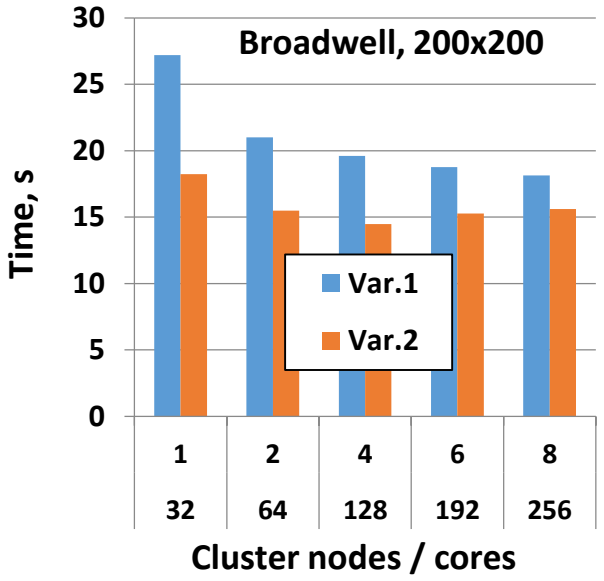
Вариант 1:
(МПН+PETSc)

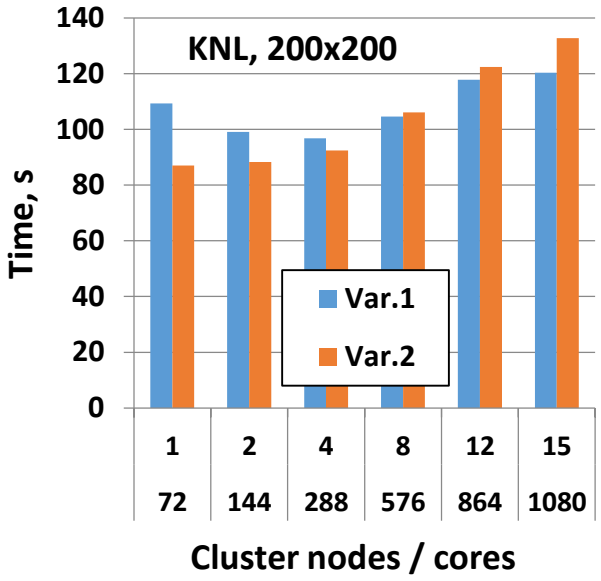


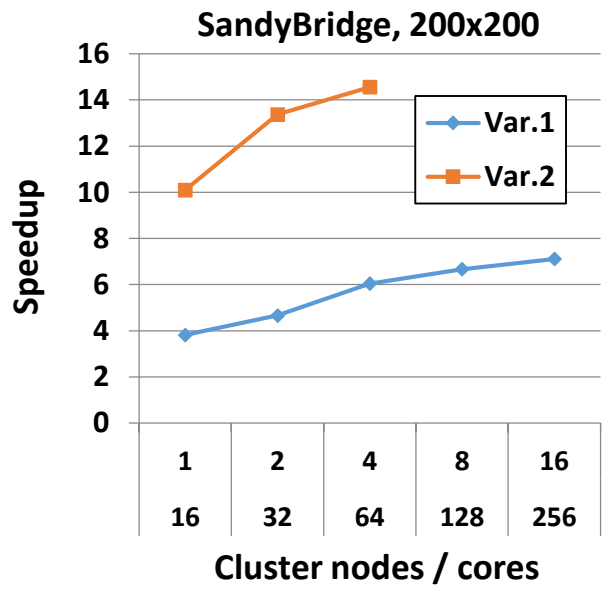
Вариант 2:
(PETSc)

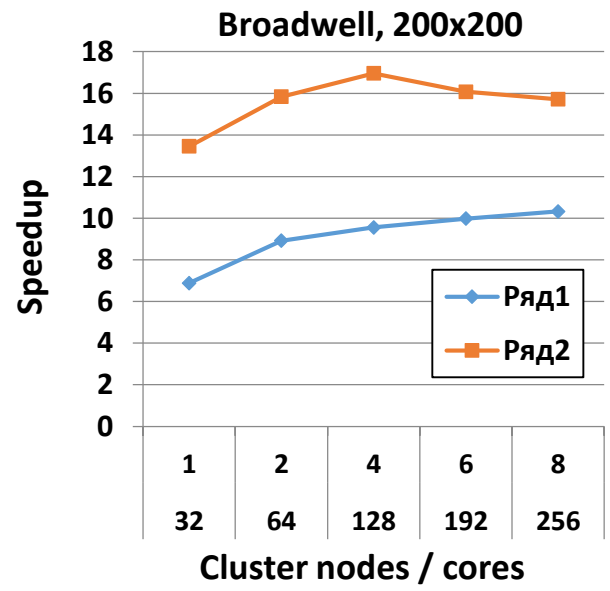
10 шагов, 200 × 200 : время (с), ускорение

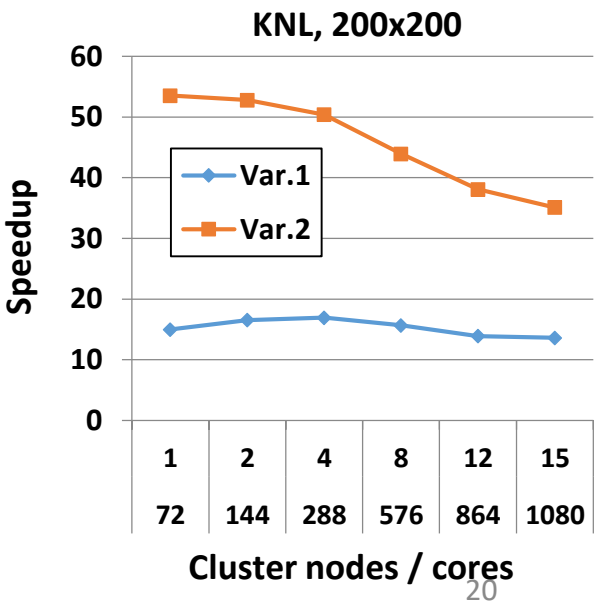




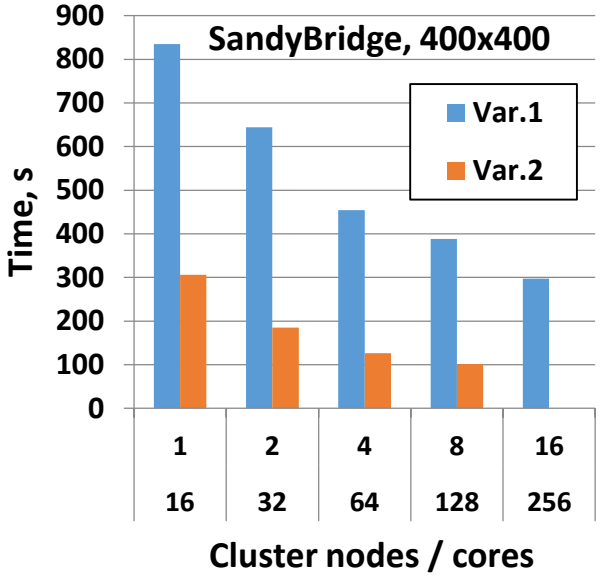


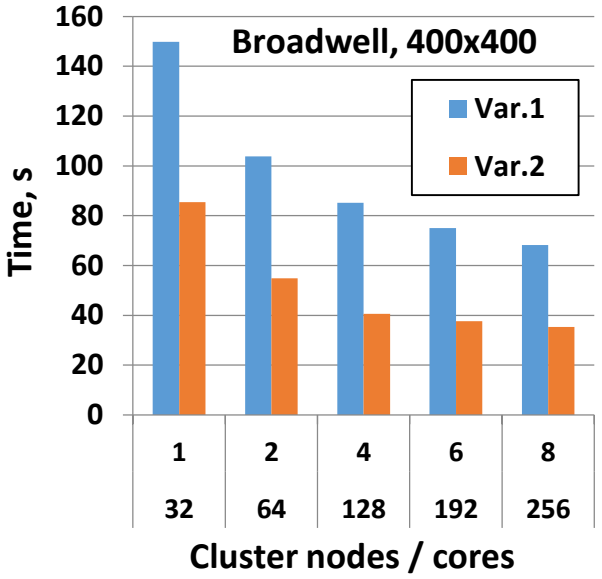


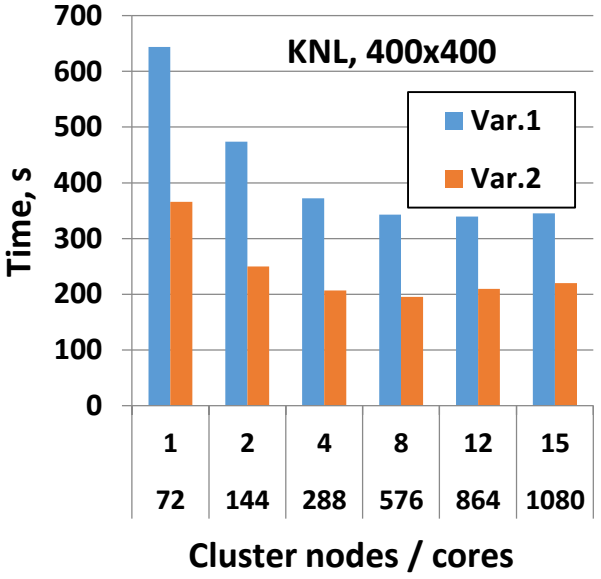


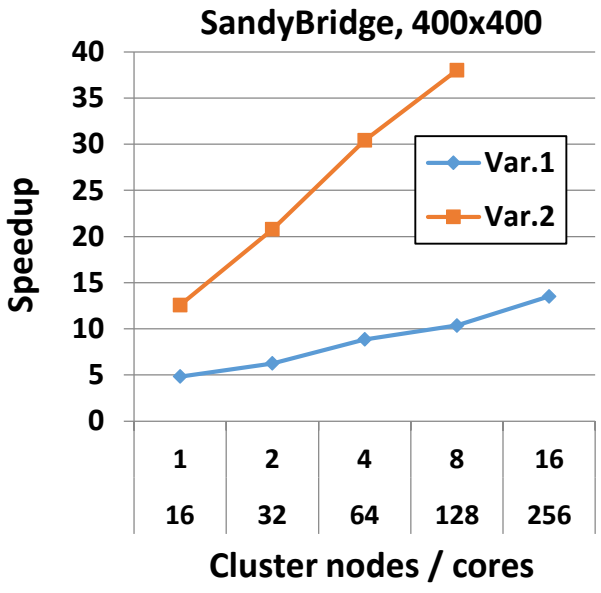


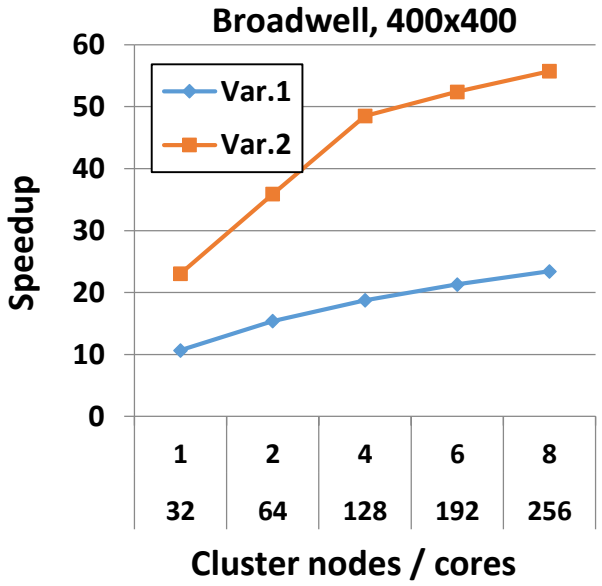
10 шагов, 400 × 400 : время (с), ускорение

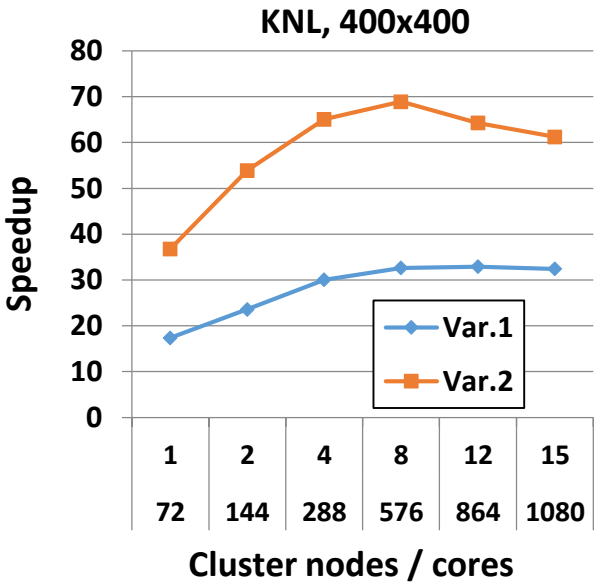




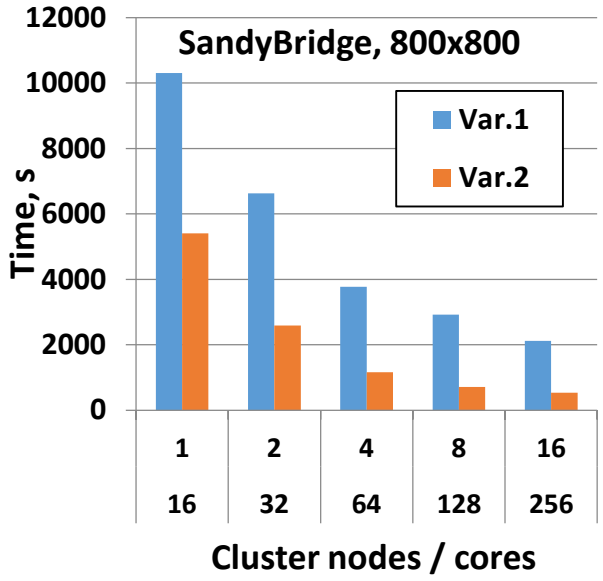


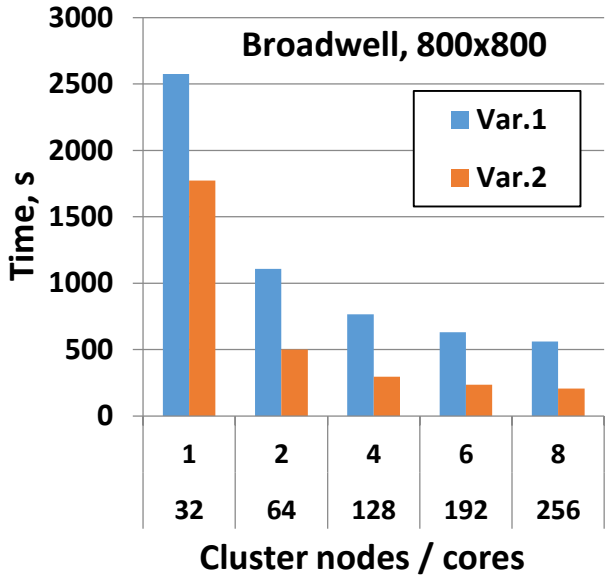


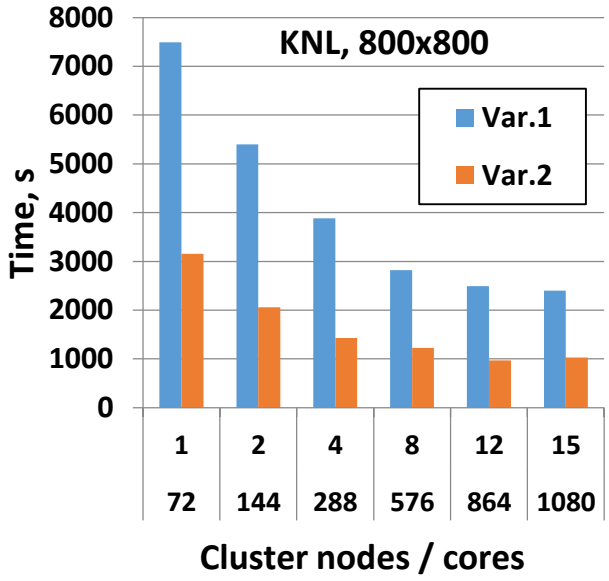


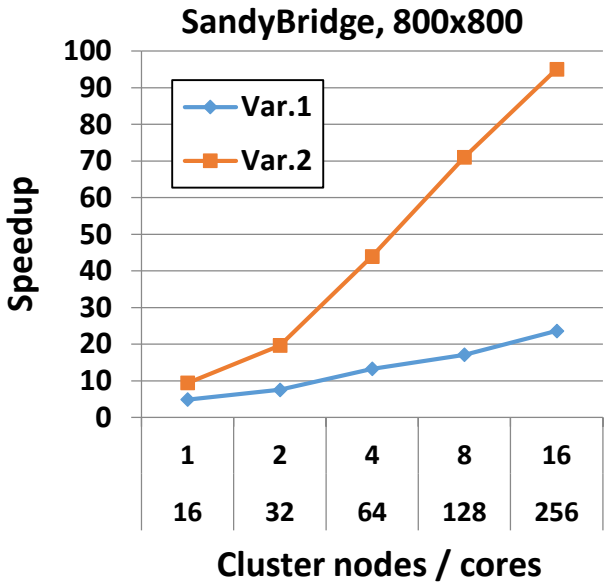


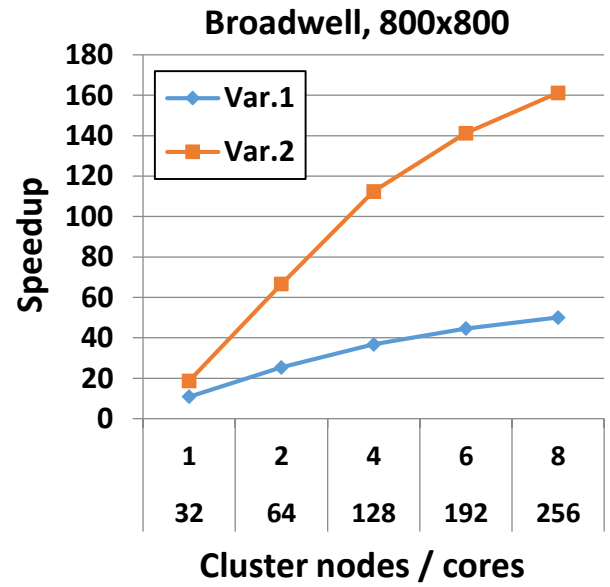
10 шагов, 800 × 800 : время (с), ускорение

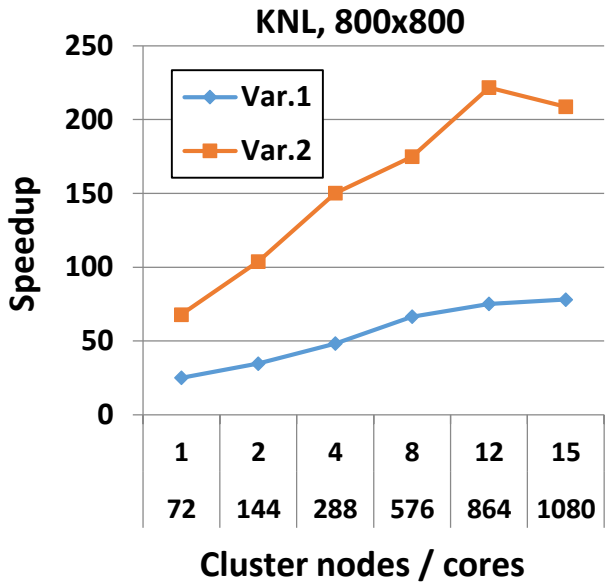






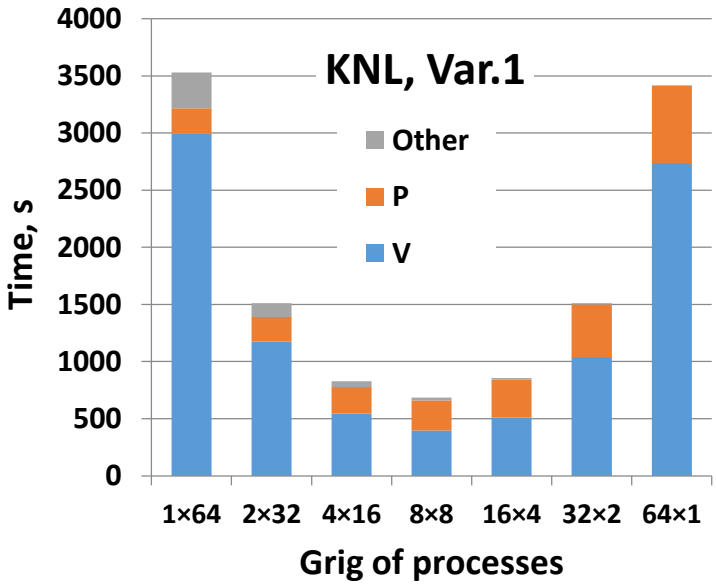
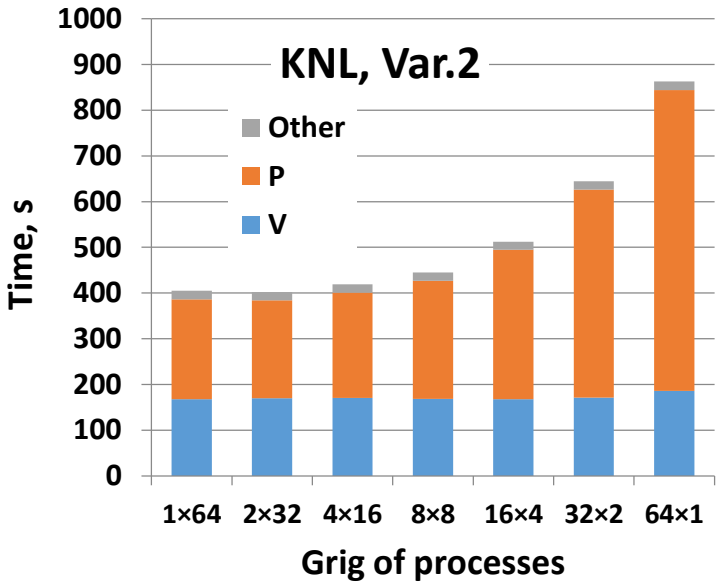






Выводы

- Созданы модель, вычислительный алгоритм и параллельная программа для моделирования нестационарных неизотермических течений дисперсных смесей вязких сжимаемых сред в присутствии примеси.
- Исследованы характеристики производительности параллельной программы на различных вычислительных системах при различных параметрах
  - Из рассмотренных решателей наилучшие характеристики показал решатель из библиотеки PETSc.
  - Наименьшее время работы и наилучшую эффективность распараллеливания показали узлы на основе процессоров Broadwell.
- Программа позволяет исследовать характер течения в наклонных каналах с учетом различного широкого спектра физических явлений.

Спасибо за внимание

Оценка затрат на различные этапы решения задачи