

УДК: 539.1

Проблемно-моделирующая среда численного решения уравнения Больцмана на кластерной архитектуре для анализа газокинетических процессов в межэлектродном зазоре термоэмиссионных преобразователей

А. В. Басалаев¹, Ю. Ю. Клосс^{2,3}, Д. Ю. Любимов^{2,4}, А. Н. Князев^{1,3},
П. В. Шувалов¹, Д. В. Щербаков^{2,3,a}, А. В. Нахапетян³

¹ ООО «ЛОКиП», Россия, 123060, г. Москва, ул. Берзарина, д. 19

² Московский физико-технический институт,
Россия, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9

³ НИЦ «Курчатовский институт»,
Россия, 123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

⁴ НПО «Луч», Россия, 142100, Московская область, г. Подольск, ул. Железнодорожная, д. 24

E-mail: ^a dmitrii.shcherbakov@phystech.edu

Получено 13.06.2018, после доработки — 19.02.2019.

Принято к публикации 20.02.2019.

Данная работа посвящена применению метода численного решения уравнения Больцмана для решения задачи моделирования поведения радионуклидов в полости межэлектродного зазора многоэлементного электрогенерирующего канала. Анализ газокинетических процессов термоэмиссионных преобразователей может быть использован для ресурсного обоснования конструкции электрогенерирующего канала. В работе рассматриваются две конструктивные схемы канала: с одно- и двусторонним выводом газообразных продуктов деления в вакуумно-цезиевую систему. Анализ проводился с использованием двумерного уравнения переноса второго порядка точности для решения левой части и проекционного метода для решения правой части — интеграла столкновений. В ходе работы был реализован программный комплекс, позволяющий производить расчет на кластерной архитектуре за счет использования алгоритма распараллеливания левой части уравнения, результаты анализа зависимости эффективности вычисления от числа параллельных узлов представлены в работе. С использованием программного комплекса были проведены расчеты и получены данные по распределениям давлений газообразных продуктов деления в полости зазора, рассмотрены различные варианты начальных давлений и потоков, обнаружена зависимость давления радионуклидов в области коллектора от давлений цезия на концах зазора. Полученные результаты качественно подтверждаются испытаниями в петлевом канале ядерного реактора.

Ключевые слова: разреженный газ, смесь газов, уравнение Больцмана, консервативный проекционный метод, численное моделирование

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов №№ 18-07-00323, 18-07-00712, 17-08-00339, 17-08-00606, 18-08-00438, 19-08-00181.

© 2019 Артем Викторович Басалаев, Юрий Юрьевич Клосс,
Дмитрий Юльевич Любимов, Александр Николаевич Князев,
Павел Вадимович Шувалов, Дмитрий Валерьевич Щербаков, Анна Васильевна Нахапетян
Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.
Чтобы получить текст лицензии, посетите вебсайт <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/>
или отправьте письмо в Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

UDC: 539.1

A problem-modeling environment for the numerical solution of the Boltzmann equation on a cluster architecture for analyzing gas-kinetic processes in the interelectrode gap of thermal emission converters

**A. V. Basalaev¹, Yu. Yu. Kloss^{2,3}, D. Yu. Lyubimov^{2,4}, A. N. Knyazev^{1,3},
P. V. Shuvalov¹, D. V. Sherbakov^{2,3,a}, A. V. Nahapetyan³**

¹ OOO “LOKiP”,

19 Berzarina st., Moscow, 123060, Russia

² MIPT,

9 Institutsky Lane, Dolgoprudny, Moscow region, 141701, Russia

³ NRC “Kurchatov Institute”,

1 Akademika Kurchatova Square, Moscow, 123182, Russia

⁴ NPO “Luch”,

24 Zheleznodorozhnaya st., Podolsk, Moscow region, 142100, Russia

E-mail: ^a dmitrii.shcherbakov@phystech.edu

Received 13.06.2018, after completion — 19.02.2019.

Accepted for publication 20.02.2019.

This paper is devoted to the application of the method of numerical solution of the Boltzmann equation for the solution of the problem of modeling the behavior of radionuclides in the cavity of the interelectrode gap of a multi-element electrogenerating channel. The analysis of gas-kinetic processes of thermionic converters is important for proving the design of the power-generating channel. The paper reviews two constructive schemes of the channel: with one- and two-way withdrawal of gaseous fission products into a vacuum-cesium system. The analysis uses a two-dimensional transport equation of the second-order accuracy for the solution of the left-hand side and the projection method for solving the right-hand side — the collision integral. In the course of the work, a software package was implemented that makes it possible to calculate on the cluster architecture by using the algorithm of parallelizing the left-hand side of the equation; the paper contains the results of the analysis of the dependence of the calculation efficiency on the number of parallel nodes. The paper contains calculations of data on the distribution of pressures of gaseous fission products in the gap cavity, calculations use various sets of initial pressures and flows; the dependency of the radionuclide pressure in the collector region was determined as a function of cesium pressures at the ends of the gap. The tests in the loop channel of a nuclear reactor confirm the obtained results.

Keywords: rarefied gas, gas mixture, Boltzmann equation, conservative projection method, numerical simulation

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2019, vol. 11, no. 2, pp. 219–232 (Russian).

The work was supported by Russian Foundation for Basic Research, research project Nos. 18-07-00323, 18-07-00712, 17-08-00339, 17-08-00606, 18-08-00438, 19-08-00181.

© 2019 Artem V. Basalaev, Yuri Yu. Kloss, Dmitry Yu. Lyubimov,
Alexander N. Knyazev, Pavel V. Shuvalov, Dmitry V. Sherbakov, Anna V. Nahapetyan
This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.
To view a copy of this license, visit <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/>
or send a letter to Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

1. Введение

В проектных разработках космических ядерных энергетических установок (ЯЭУ) развитие получили термоэмиссионные реакторы-преобразователи на тепловых и промежуточных нейтронах [Васильковский и др., 2005]. Одним из элементов такого реактора является электрогенерирующий канал (ЭГК), содержащий вентилируемый твэл с ядерным топливом на основе диоксида урана. На работоспособность многоэлементного ЭГК с оксидным ядерным топливом с сообщающимися полостями твэла и межэлектродного зазора (МЭЗ) и, в частности, на изменение выходных электрических характеристик влияют многочисленные факторы. Одним из них является наличие в МЭЗ продуктов деления, образующихся в топливе при работе реактора [Любимов и др., 2008]. Формирующиеся в изотермической топливной полости газы, состоящие из основных и примесных компонентов, продуктов деления и их оксидов, попадают в МЭЗ, диффундируя в газообразном цезии через ловушку и газоотводящий тракт [Гонтарь и др., 2008]. Многоэлементный ЭГК представляет собой сложную инженерную конструкцию, которая содержит последовательно соединенные электрогенерирующие элементы (ЭГЭ) с внутренним расположением тепловыделяющих элементов (твэлов), заключенные в герметичную оболочку, коммутационные переходники, соединяющие эмиттеры с коллекторами соседних электрогенерирующих элементов. Внутри коммутационных переходников выполнены каналы, соединяющие полости МЭЗ и твэл.

Для анализа газообразной смеси в полости ЭГК используется численный метод решения уравнения Больцмана [Коган, 1967], который описывает поведение разреженных смесей газов. Одной из проблем численного метода является существенное время, необходимое на проведение вычислений. В процессе рассчитывается функция распределения, которая зависит в общем случае от семи параметров: трех пространственных координат, координат трехмерного вектора скорости и времени. Поэтому вычисления требуют достаточного объема оперативной памяти и мощности процессора. Одной из особенностей функции распределения является ее локальность в пространстве, что позволяет эффективно распараллеливать вычисления. Критерием эффективности является близкий к линейному рост производительности при увеличении числа параллельных узлов.

Метод решения численного уравнения Больцмана используется для анализа динамики разреженного газа с 60 годов XX века, направление стало разрабатываться в работах американских ученых Нордсика, Хикса и Йена [Nordsieck, Hicks, 1967], после чего производились улучшения метода с целью уменьшить погрешность вычислений и требования к вычислительным ресурсам: в работе [Черемисин, 1997] был предложен консервативный проекционный метод, а в работе [Черемисин, 2006] он был улучшен, в результате современный метод решения уравнения Больцмана позволяет эффективно решать различные задачи динамики разреженного газа [Додулад и др., 2016]. В частности, метод используется для решения задачи о структуре плоской ударной волны [Додулад, Черемисин, 2013], которая позволяет оценить точность метода. Также метод актуален для исследования течений газа с ударными волнами в узких каналах, возникающих в устройствах предназначенных для генерирования молекулярных пучков высокой энергии [Nobuya Miyoshi et al., 2009]. Одной из областей применения метода является расчет насоса Кнудсена, принципы которого используются в современной технике в миниатюрных физических устройствах, например газоанализаторах или системах разделения смесей газов [Takata et al., 2007].

Целью данной работы была разработка программной среды, которая реализует метод численного решения уравнения Больцмана и применима к решению задач моделирования газокINETических процессов в полости МЭЗ. В работе приводится алгоритм распараллеливания решения кинетического уравнения Больцмана и рассматривается график увеличения производительности в зависимости от числа параллельных узлов.

2. Математическая постановка задачи

Для описания эволюции разреженной газообразной смеси используется уравнение Больцмана с потенциалом взаимодействия молекул $U(r)$ — упругих шаров:

$$\begin{cases} U(r) = \infty, & r < d, \\ U(r) = 0, & r > d. \end{cases}$$

Газообразная среда с концентрацией $n(\mathbf{r}, t)$ представлена функцией распределения по импульсам $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$:

$$f = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}.$$

Для задач об эволюции газовых смесей, геометрия, начальные и граничные условия которых изотропны вдоль одной из осей, для ускорения счета возможно использование двумерного уравнения Больцмана, поскольку дифференциал функции распределения вдоль этой оси обращается в ноль:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p_x}{m} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{p_y}{m} \frac{\partial f}{\partial y} = \int (ff'_1 - ff_1) g b db d\varepsilon d\mathbf{p}_1,$$

где

$$f = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad f_1 = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1, t), \quad f' = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t), \quad f'_1 = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}'_1, t), \\ g = |\mathbf{p}_1 / m_1 - \mathbf{p} / m|.$$

В приведенных формулах z, b, ε — цилиндрическая система координат, ось z которой проходит через молекулу с импульсом \mathbf{p} и параллельна ему, b — прицельное расстояние (радиус), а ε — азимутальный угол, g — относительная скорость сближения, \mathbf{p}, \mathbf{p}_1 — импульсы молекул до столкновения, $\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1$ — импульсы, приобретенные молекулами после столкновения, определяемые некоторым образом из начальных условий:

$$\mathbf{p}' = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1, b, \varepsilon), \quad \mathbf{p}'_1 = \boldsymbol{\varphi}_1(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1, b, \varepsilon),$$

где $\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi}_1$ — векторные функции, определяемые потенциалом взаимодействия.

В случае когда рассматриваются газообразные смеси, состоящие из продуктов деления, необходимо учитывать явление бета-распада согласно закону радиоактивного распада:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N,$$

и, поскольку при бета-распаде импульс частицы меняется слабо, уравнение Больцмана можно дополнить формулой

$$\frac{df_i}{dt} = -\lambda_i f_i + \sum_j \lambda_j f_j,$$

где i — индекс газа, испытывающего распад, а индексы j — индексы газов, продуктом бета-распада которых является i -ый газ, λ_i — постоянная бета-распада i -го газа.

Уравнение Больцмана доопределяется начальными и граничными условиями. В качестве начального условия используется распределение Максвелла с заданной начальной температурой T_0 и давлением P_0 :

$$f_0(\mathbf{p}) = \frac{P_0}{kT_0} \frac{\exp(-\mathbf{p}^2 / 2mkT_0)}{\int_P \exp(-\mathbf{p}^2 / 2mkT_0) d\mathbf{p}}.$$

Используется два типа граничных условий: диффузное отражение от стенки с заданной температурой и условие постоянного давления. Для обоих условий функция распределения доопре-

деляется распределением Максвелла для молекул, влетающих в рассматриваемую область через границу:

$$f_g(\mathbf{p}, t) = h(t) \exp\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2mkT_g}\right),$$

где $h(t)$ — коэффициент, определяемый согласно типу граничного условия: для отражения от стенки он определяется из равенства потоков налетающих и отражаемых молекул, для условия постоянного давления — из заданного давления на границе.

3. Численная реализация

Для решения системы уравнений Больцмана используется монотонная разностная схема на прямоугольной сетке с использованием метода расщепления по физическим процессам [Аристов, Черемисин, 1976]. На первом этапе решается уравнение переноса поочередно вдоль направлений распространения газа. На втором этапе решается уравнение релаксации, рассматриваются процессы межмолекулярного взаимодействия в газах.

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p_x}{m} \frac{\partial f}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p_y}{m} \frac{\partial f}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial f}{\partial t} &= I(f).\end{aligned}$$

Прямоугольная пространственная сетка покрывает всю область счета, а также содержит фиктивные ячейки, необходимые для расчета граничных условий в процессе решения уравнения переноса. Общий вид пространственной сетки:

$$\begin{aligned}\omega_{h_x} &= \{x_i = h_x(i - 1/2), i = 1, \dots, N_x\}, \quad h_x = L / N_x, \\ \omega_{h_y} &= \{y_i = h_y(i - 1/2), i = 1, \dots, N_y\}, \quad h_y = H / N_y, \\ \omega_{h_x \times h_y} &= \omega_{h_x} \times \omega_{h_y}.\end{aligned}$$

Для решения уравнения переноса воспользуемся разностной схемой второго порядка точности — TVD-схемой (Total Variation Diminishing Scheme). Такая схема обладает свойствами монотонности и неотрицательности решения, что отвечает поведению функции распределения, которая как физическая величина представляет из себя плотность газа. Рассмотрим разностный аналог для уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\tau} + \frac{p}{m} \frac{\tilde{f}_{i+1/2}^j - \tilde{f}_{i-1/2}^j}{h} &= 0, \\ \tilde{f}_{i+1/2}^j &= \begin{cases} f_i^j + \frac{1-\gamma}{2} \overline{\Delta f}_i^j, & p > 0, \\ f_{i+1}^j - \frac{1-\gamma}{2} \overline{\Delta f}_{i+1}^j, & p < 0. \end{cases}\end{aligned}$$

В уравнениях среднее отклонение функции распределения $\overline{\Delta f}_i^j$ соответствует одному из нескольких ограничителей второго порядка точности, наиболее оптимальным выбором является superbee ограничитель, при котором среднее отклонение определяется следующим образом:

$$\overline{\Delta f}_i^j = \max(\min(2|f_{i+1}^j - f_i^j|, |f_i^j - f_{i-1}^j|), \min(|f_{i+1}^j - f_i^j|, 2|f_i^j - f_{i-1}^j|)).$$

Для того чтобы данная схема была устойчивой, необходимо выполнение условия, исходя из которого определяется временной шаг в задаче

$$\gamma = \left| \frac{p \tau}{m \hbar} \right|, \quad 0 \leq \gamma \leq 1.$$

Для решения уравнения релаксации запишем его в виде

$$\frac{f(t + \tau) - f(t)}{\tau} = I(t) + O(\tau),$$

где τ — некоторый выбранный временной шаг, тогда после преобразования

$$f(t + \tau) = f(t) + \tau I(t) + O(\tau^2).$$

Отдельно рассмотрим расчет интеграла столкновений, для этого воспользуемся проекционным методом, более подробно описанным в [Черемисин, 1997], при котором интеграл можно переписать в виде

$$I_\gamma = \frac{\pi b_{\max} V_{sph}}{2} \frac{N_0}{N_\nu} \sum_{\nu=0}^{N_\nu} \left\{ \delta_{\alpha_\nu, \gamma} + \delta_{\beta_\nu, \gamma} - (1 - r_\nu) (\delta_{\lambda_\nu, \gamma} + \delta_{\mu_\nu, \gamma}) - r_\nu (\delta_{\lambda_\nu + s_\nu, \gamma} + \delta_{\mu_\nu - s_\nu, \gamma}) \right\} \Omega_\nu,$$

$$\Omega_\nu = \left\{ \left(f_{\lambda_\nu} f_{\mu_\nu} \right)^{1-r_\nu} \left(f_{\lambda_\nu + s_\nu} f_{\mu_\nu - s_\nu} \right)^{r_\nu} - f_{\alpha_\nu} f_{\beta_\nu} \right\} \left| \frac{\vec{p}_{\alpha_\nu}}{m_1} - \frac{\vec{p}_{\beta_\nu}}{m} \right| b_\nu,$$

$$r_\nu = \frac{E_{0\nu} - E_{1\nu}}{E_{2\nu} - E_{1\nu}}, \quad E_{0\nu} = \vec{p}_{\alpha_\nu}^2 + \vec{p}_{\beta_\nu}^2, \quad E_{1\nu} = \vec{p}_{\lambda_\nu}^2 + \vec{p}_{\mu_\nu}^2, \quad E_{2\nu} = \vec{p}_{\lambda_\nu + s_\nu}^2 + \vec{p}_{\mu_\nu - s_\nu}^2.$$

В формулах выше из импульсной сетки выбираются узлы α_ν, β_ν , отвечающие за импульсы молекул до столкновения, и узлы λ_ν, μ_ν , отвечающие за импульсы молекул после столкновения, соответственно. Причем узлы $\lambda_\nu, \lambda_\nu + s_\nu$ выбираются так, чтобы выполнялось неравенство:

$$E_1 < E_0 < E_2,$$

а узел μ_ν выбирают, чтобы выполнялся закон сохранения импульса:

$$\mu_\nu = \alpha_\nu + \beta_\nu - \lambda_\nu.$$

Данный численный интеграл гарантирует выполнение законов сохранения энергии и импульса для сталкивающейся пары молекул, а также обращается в ноль на максвелловском распределении.

Окончательно для уравнения релаксации аппроксимируем функции их дискретными аналогами, получим

$$f_\gamma^{j+1} = f_\gamma^j + \tau I_\gamma^j.$$

Эта разностная схема явная, поскольку вклады в интеграл столкновений вычисляются через функции распределения из нижнего временного слоя. Для повышения точности вычисления интеграла столкновений узлы скоростной сетки для расчета выбираются с помощью метода сеток Коробова [Коробов, 1989].

Там, где необходимо учитывать бета-распад газов, схема расщепления по физическим процессам дополняется разностной схемой первого порядка:

$$\frac{f^{j+1} - f^j}{\tau} = -\lambda f^j.$$

4. Описание программы

Для проведения расчетов была реализована программа на языке C++, для использования программы необходимы библиотеки Boost и Open MPI. Для обработки результатов расчетов используется пакет Matplotlib на языке Python. Программа решает задачу расчета эволюции газовых смесей в пространстве, которое может быть представлено в двумерном виде. В программе используются алгоритмы генерации пространственной сетки для TVD-схемы, расщепления на физические процессы, разбиения и объединения пространственной сетки по параллельным процессам.

Для генерации сетки используется алгоритм, который на основании заданных прямоугольных областей с начальными и граничными условиями методом наложения областей друг на друга создает общую сетку. Граничные условия могут быть внутренними или внешними в зависимости от типа прямоугольника: заполненного газом или заполненного веществом. Это позволяет задавать большой спектр двумерных областей счета.

Для использования TVD-метода необходимо выделение дополнительных ячеек для эмуляции граничных условий, это происходит после получения уже готовой сетки с заданными начальными условиями и геометрией, данные ячейки не учитываются при получении макропараметров и не попадают в конечные файлы с результатами.

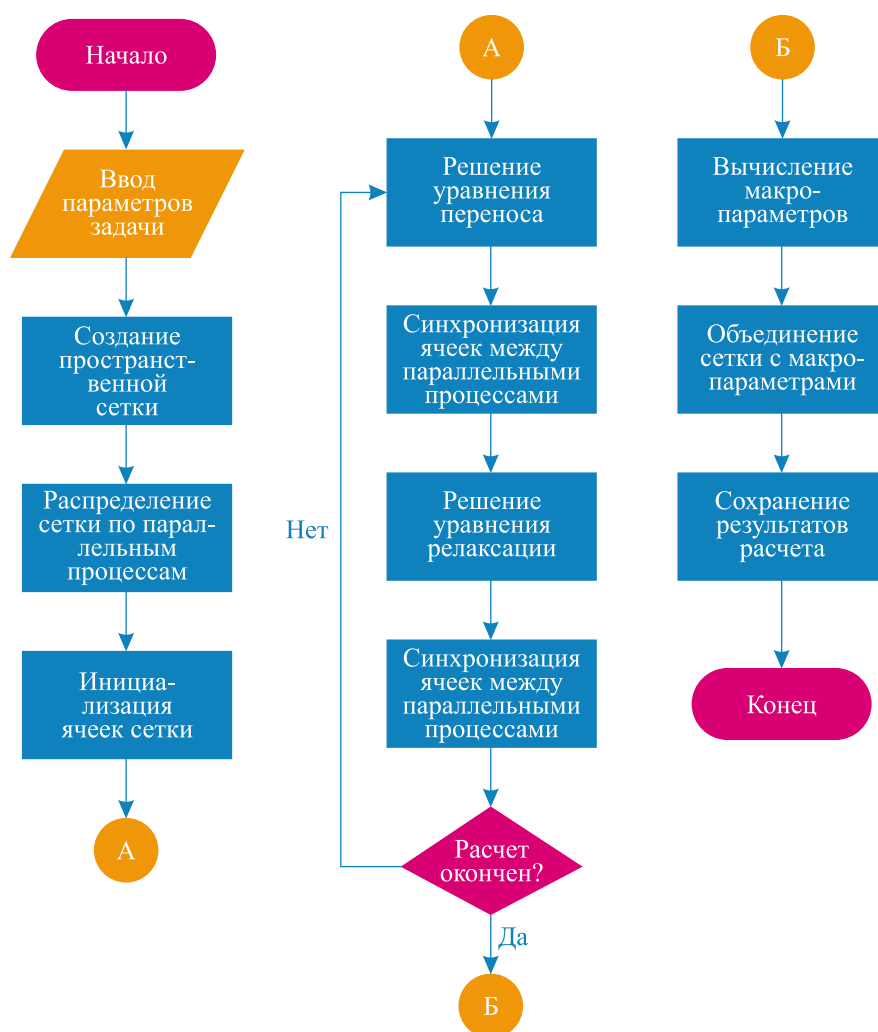


Рис. 1. Блок-схема программы

Для ускорения счета в программе реализована распараллеливание с помощью средств MPI, данные пространственных ячеек разделяются по доступным параллельным узлам поровну, после каждой операции по вычислению данных идет синхронизация значений функции распределения между узлами. При проведении расчетов на нескольких узлах в пространственную сетку добавляются фиктивные ячейки, которые содержат значения и информацию о пространственной ячейке соседнего узла. Для ввода и вывода данных используется узел с номером 0, который физически запускается на основной машине, этот узел создает пространственную сетку и распределяет ее по остальным узлам. Для получения результатов расчетов данные всех узлов собираются на основном узле и сохраняются в файл на основной машине.

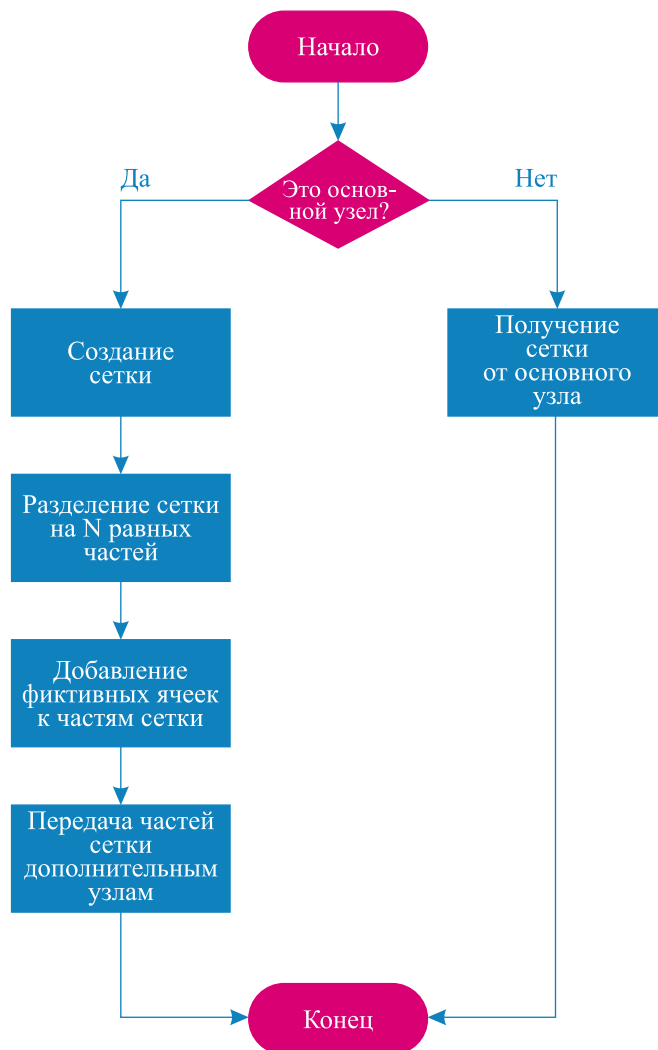


Рис. 2. Блок-схема алгоритма распределения сетки по параллельным узлам

При решении уравнения переноса для ячейки (x_i, y_j) необходимы в общем случае значения в двух соседних ячейках $(x_{i\pm 2}, y_{j\pm 2})$, поскольку используется TVD-метод, обладающий вторым порядком точности. При разделении сетки по параллельным узлам для ячеек, находящихся на границе разделения, создаются фиктивные ячейки, эмулирующие ячейки, которые находятся в части сетки другого узла. После вычисления следующего шага значения функции распределения меняются и производится передача значений из реальных ячеек сетки в фиктивные ячейки.

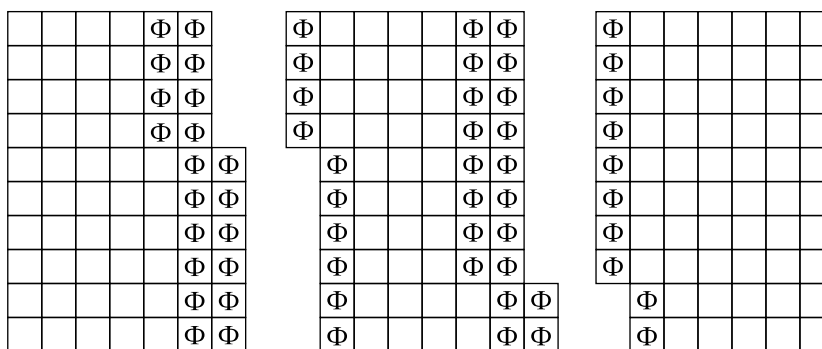


Рис. 3. Распределение фиктивных ячеек при разбиении сетки между узлами

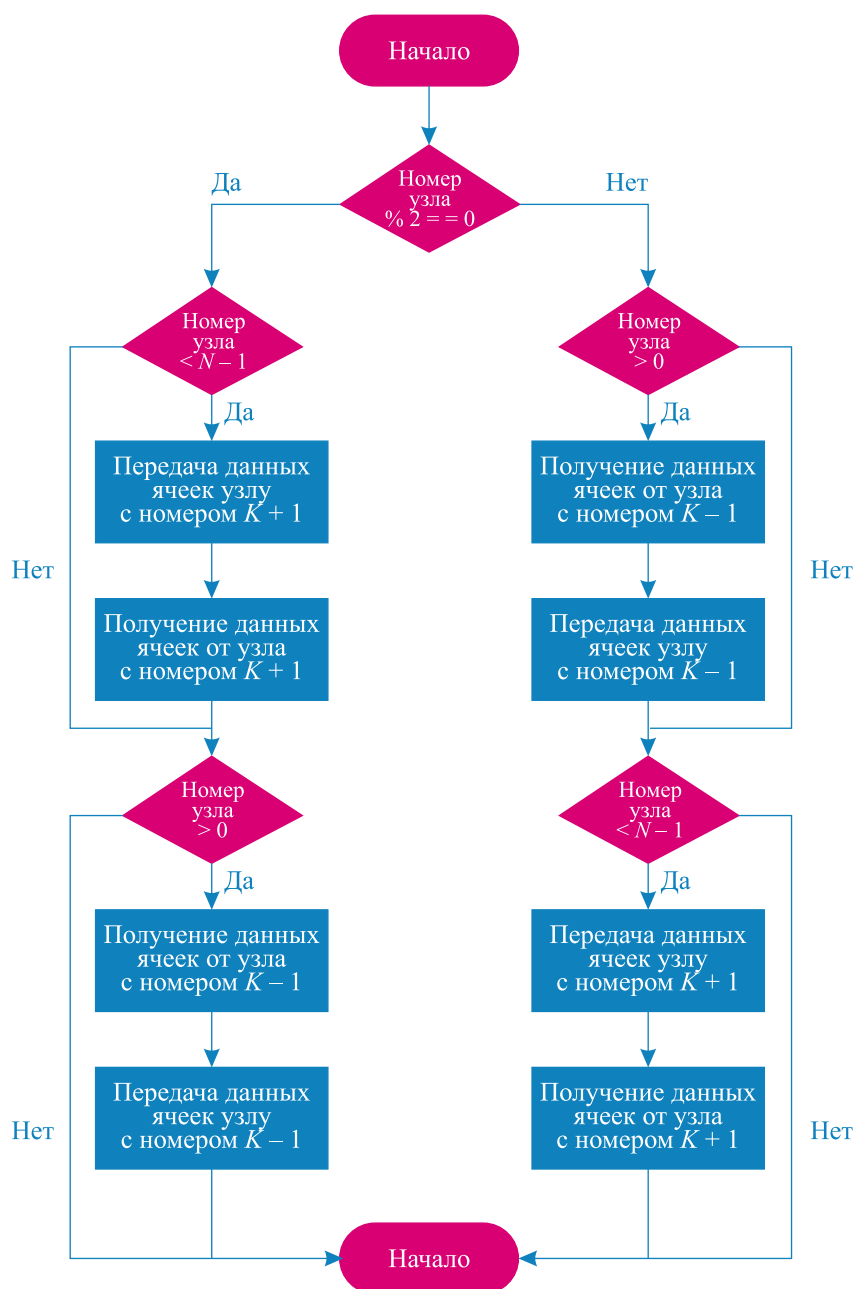


Рис. 4. Блок-схема алгоритма синхронизации фиктивных ячеек сетки

Время, необходимое программе для проведения вычислений, в идеальном случае должно линейно падать с увеличением количества узлов распараллеливания, но из-за того, что необходимо обмениваться данными между узлами при синхронизации значений фиктивных ячеек, требуется больше времени для проведения расчетов. Чтобы получить наибольший прирост скорости вычислений, использовались следующие критерии разбиения сетки: каждый узел должен просчитывать одинаковое число ячеек, число фиктивных ячеек должно быть минимально при выбранном числе узлов. Чтобы достичь этих критериев, двумерная задача разбивается на равные области вдоль наибольшей стороны прямоугольной области, тогда число фиктивных ячеек будет составлять $N_{\phi} = 3N_y(n-1)$ при условии $N_y \leq N_x$.

В результате работы программы создаются бинарные файлы со значениями макропараметров (давление, температура, поток вещества) в каждой ячейке. Формат файлов — это последовательная запись номеров пространственных ячеек, и значения макропараметра — $\{N_x, N_y, X\}$, в начале каждого файла записывается размерность сетки, используемой при расчетах. Для генерации графиков используется скрипт на языке Python с использованием пакета Matplotlib.

5. Эффективность алгоритма распараллеливания

Чтобы оценить эффективность алгоритма распараллеливания, проводились расчеты в одной и той же прямоугольной области с длиной 100 мм и шириной 1 мм. При построении сетки использовалось 42 000 пространственных ячеек, при этом число фиктивных ячеек, используемых для синхронизации, составляло в среднем 80 ячеек на один узел, скоростная сетка состояла из 8000 ячеек, для таких параметров сетки типичное время расчета на одном узле — 5.5 часов. Расчеты проводились на кластере ОВК НИЦ «Курчатовский институт», на процессорах Intel Xeon E5-2680v3 с тактовой частотой 2.5 ГГц и 12 ядрами на каждый процессор. На каждое ядро возможно использование 5.3 Гб оперативной памяти. Ускорение рассчитывалось с использованием n узлов, где n выбиралось в диапазоне $[1, 100]$, на рис. 5 представлены графики зависимости коэффициента ускорения счета $k = t_1 / t_n$ в зависимости от числа узлов n , пунктирной линией обозначено идеальное значение коэффициента ускорения.

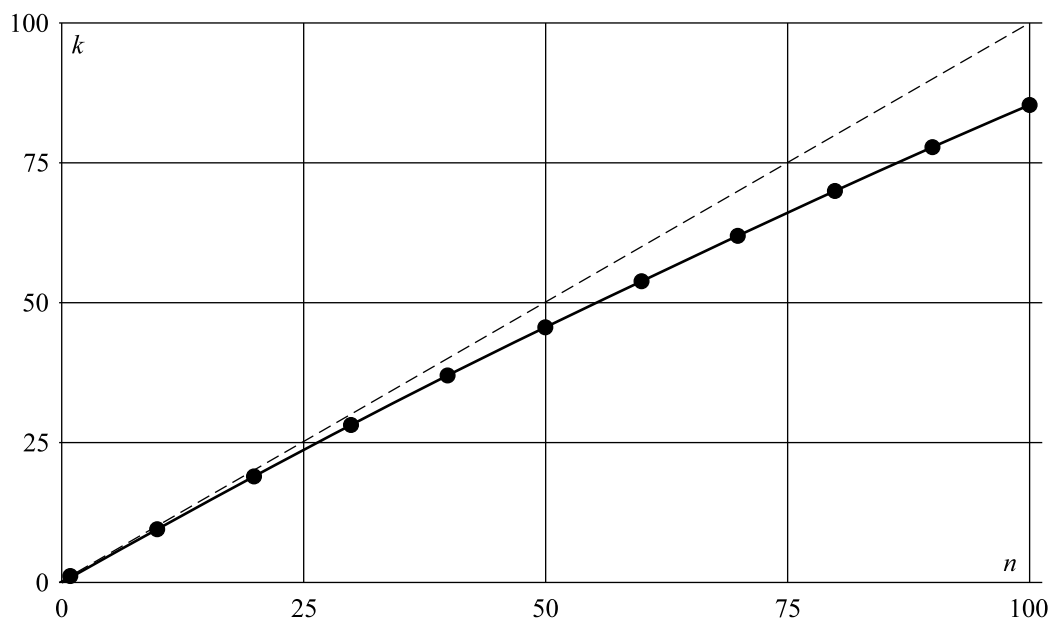


Рис. 5. Зависимость ускорения счета от числа параллельных узлов

Поскольку при распараллеливании пространственная сетка распределяется равномерно между узлами, а вычисления на каждом шаге счета проводятся независимо, то идеальный прирост производительности линейно зависит от числа параллельных узлов. Отклонение полученного коэффициента от идеального значения связано с потерями времени на синхронизацию значений в фиктивных ячейках:

$$k = \frac{nt_1}{t_1 + nmt_s},$$

где t_1 — время работы программы на одном узле, t_s — время синхронизации значений одной фиктивной ячейки, m — число фиктивных ячеек. Время синхронизации фиктивной ячейки зависит от времени передачи информации между узлами и определяется конфигурацией узлов на кластере, а время работы программы зависит от общего числа ячеек, поэтому, чтобы распараллеливание работало эффективно, необходимо выбирать число узлов таким образом, чтобы число фиктивных ячеек было существенно меньше, чем общее число рабочих ячеек. Также на коэффициент ускорения влияет алгоритм распределения сетки между узлами, используемый в работе алгоритм генерирует одинаковое количество фиктивных ячеек для любого числа узлов, поскольку разделяет сетку равномерно вдоль одной оси, поэтому с увеличением количества узлов рост коэффициента ускорения замедляется. Для того чтобы повысить эффективность распараллеливания, можно использовать другие алгоритмы распределения сетки, например K-way или Spectral, для уменьшения количества фиктивных ячеек [Клосс, Мартынов, 2012].

6. Анализ газообразной смеси в полости МЭЗ

С использованием разработанной программной среды был проведен анализ газокинетических процессов в полости МЭЗ. Были рассмотрены две конструктивные схемы ЭГК с сообщающимися полостями МЭЗ и твэл: а) с односторонним выводом газообразных продуктов деления из МЭЗ в вакуумно-цезиевую систему; б) двусторонним выводом газообразных продуктов деления в вакуумно-цезиевую систему и прокачкой пара цезия через МЭЗ. Сам межэлектродный зазор представляет из себя полость между цилиндрами, длина — 500 мм, а ширина — 0.4 мм. Полость заполнена рабочим телом — цезием — под давлением 150 Па, согласно оценочным расчетам давление Хе, Кг в полости МЭЗ составляет 10^{-3} – 10^{-4} Па [Гонтарь и др., 2008], для смеси характерны числа Кнудсена в диапазоне 0.2–100.

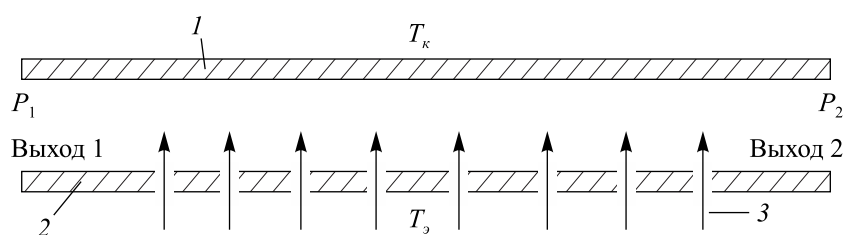


Рис. 6. Двумерный вид многоэлементного ЭГК: 1 — коллекторный пакет, 2 — эмиттеры, 3 — поступление газообразных продуктов деления

Граничными условиями на эмиттере и коллекторе является диффузное отражение с заданной температурой: коллектор — 900 К, эмиттер — 1200–1500 К. Температура на выходах 1 и 2 МЭЗ устанавливается как градиент температуры коллектора и эмиттера (рис. 6):

$$T_{1,2} = T_k + \frac{h}{H}(T_e - T_k),$$

где H — это ширина МЭЗ, а h — расстояние от коллектора до точки, в которой задается температура. В схеме с односторонним выводом газообразных продуктов деления начальное давление цезия в полости зазора равно 150 Па, граничным условием на входе 1 является диффузное отражение, а на входе 2 — условие постоянного давления (рис. 6). В схеме с двусторонним выводом газообразных продуктов деления граничным условием на обоих выходах МЭЗ было условие постоянного давления, начальное давление цезия определялось как градиент давления на концах (рис. 6):

$$P_0 = P_1 + \frac{l}{L}(P_2 - P_1),$$

где L — это длина МЭЗ, а l — расстояние от выхода 1 до точки, в которой задается давление. Расчет проводится до установления постоянного потока через выходы 1 и 2, рассматривалось отношение среднего потока в области выхода за последние 100 итераций к среднему потоку за последние 1000 итераций; если отношение было близко к 1, то расчет завершался.

Для описания поведения газообразных продуктов деления в полости МЭЗ рассматриваются семь газов: $^{133}_{55}\text{Cs}$, $^{88}_{38}\text{Kr}$, $^{138}_{54}\text{Xe}$, $^{88}_{37}\text{Rb}$, $^{88}_{38}\text{Sr}$, $^{138}_{55}\text{Cs}$, $^{138}_{56}\text{Ba}$. Концентрация цезия в несколько раз превышает концентрацию всех остальных газов, концентрация продуктов распада криптона и ксенона отличается от концентрации самих газов на несколько порядков. Поэтому для ускорения счета рассматриваются столкновения $\text{Cs} - \text{Cs}$, $\text{Cs} - \text{Xe}$, $\text{Cs} - \text{Kr}$.

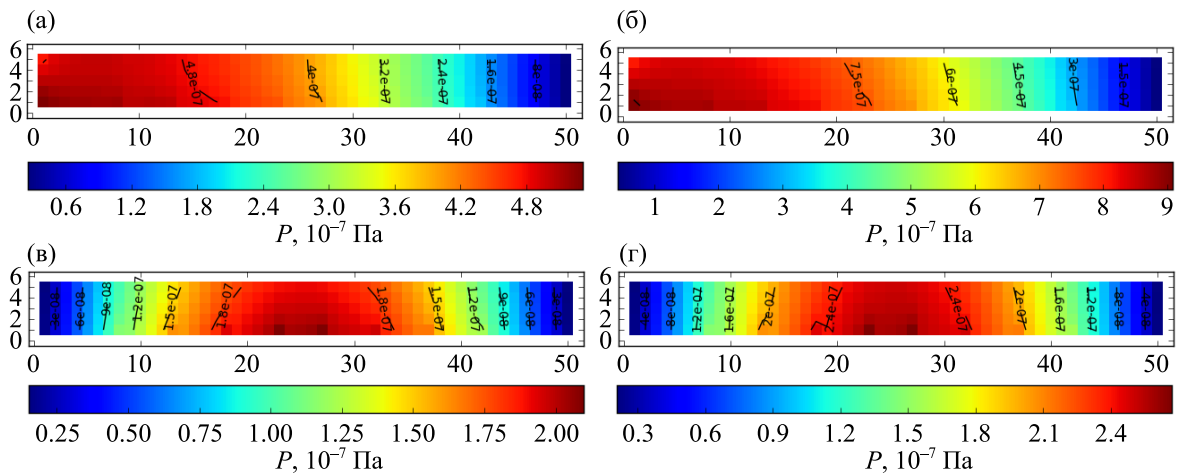


Рис. 7. Давление в схеме А: а) Kr; б) Xe; в схеме Б: в) Kr; г) Xe

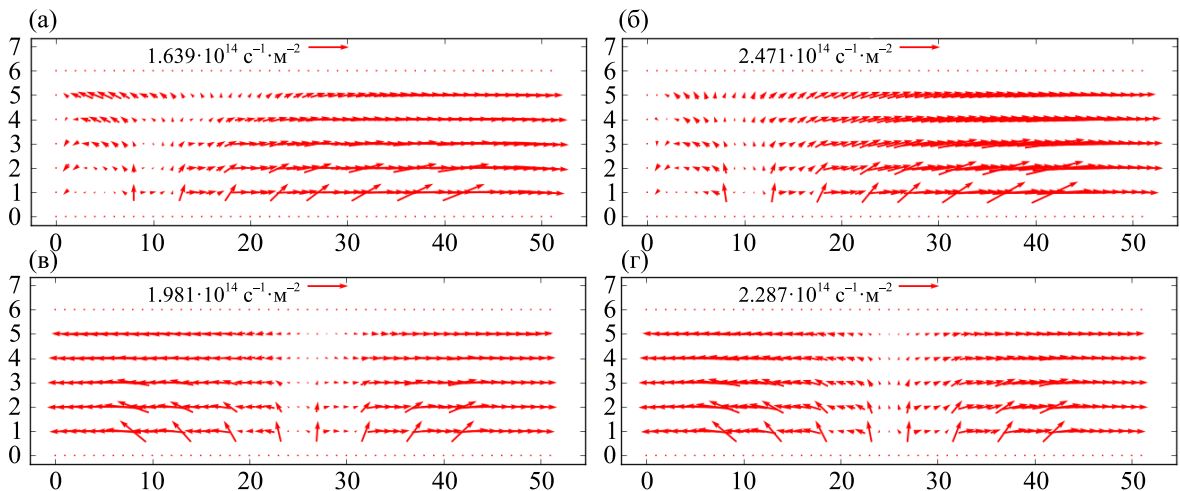


Рис. 8. Поток в схеме А: а) Kr; б) Xe; в схеме Б: в) Kr; г) Xe

В результате работы программы были получены графики распределения давления (рис. 7) и потока (рис. 8). На рисунках вдоль осей обозначены индексы ячеек в пространственной сетке. На рис. 8, а, б в полости МЭЗ устанавливается постоянный поток ГПД от газовых каналов в коллекторе к выходу 2, а в области выхода 1 скапливаются газообразные продукты деления (рис. 7, а, б). На рис. 8, в, г поток газообразных продуктов деления распределяется между 2 концами МЭЗ, причем область повышенного давления находится в центре МЭЗ (рис. 7, в, г). Был проведен анализ для разных значений потока Хе, Кг и давления Cs на входе 1 в схеме с двусторонним выводом газообразных продуктов деления, получено, что с ростом потока Хе, Кг повышается их давление в области коллектора, а с ростом давления Cs снижается давление Хе, Кг и повышается их поток через выход 2 [Бабайлов и др., 2017].

7. Заключение

В работе была приведена реализация численного метода решения уравнения Больцмана и приведено описание проблемно-моделирующей среды. Показана применимость этой среды к решению задач анализа газообразных продуктов деления в полости МЭЗ для двух конструктивных схем. Рассмотрен алгоритм распараллеливания, позволяющий проводить расчеты на многопроцессорных машинах. Оценена эффективность алгоритма и приведены критерии выбора параметров расчета.

Список литературы (References)

- Аристов В. В., Черемисин Ф. Г. Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // Докл. АН СССР. — 1976. — Т. 231, № 1. — С. 49–52.
Aristov V. V., Tcheremisin F. G. Rashepleniye neodnorodnogo kineticheskogo operatora uravneniya Bolzmana [Splitting of the inhomogeneous kinetic operator of the Boltzmann equation] // Doklady AN USSR. — 1976. — Vol. 231, No. 1. — P. 49–52 (in Russian).
- Бабайлов А. А., Клосс Ю. Ю., Рябченков Д. В., Щербаков Д. В., Любимов Д. Ю., Шувалов П. В., Потапов А. П. Моделирование газодинамических процессов в межэлектродном зазоре многоэлементного термоэмиссионного электрогенерирующего канала на основе решения кинетического уравнения // Атомная энергия. — 2017. — Т. 123, вып. 1. — С. 35–39.
Babaylov A. A., Kloss Yu. Yu., Ryabchenkov D. V., Sherbakov D. V., Lubimov D. Yu., Shubalov P. V., Potapov A. P. Modelirovaniye gasodimanicheskikh processov v mezelectrodnom zazore mnogielementnogo termoemissionnogo electrogeneriruyushchego kanala na osnove resheniya kineticheskogo uravneniya [Modeling of gas-dynamic processes in the interelectrode gap of a multielement thermionic electrogenerating channel based on the solution of the kinetic equation] // Nuclear Energy. — 2017. — Vol. 123, No. 1. — P. 35–39 (in Russian).
- Васильковский В. С., Андреев П. В., Зарицкий Г. А. Проблемы космической энергетики и роль ядерных энергетических установок в их решении // Межд. конф. «Ядерная энергетика в космосе – 2005»: сборник. — Москва – Подольск, 1–3 марта 2005 г. — Т. 1. — С. 20–25.
Vasilkovskiy V. S., Andreev P. V., Zarickiy G. A. Problemy kosmicheskoy energetiki i rol yadernih energeticheskikh ustanovok v ih reshenii [Problems of space energy and the role of propulsion systems in their solution] // International conference “Nuclear energy in space – 2005”: sbornik. — 2005. — Vol. 1. — P. 20–25 (in Russian).
- Гонтарь А. С., Гриднев А. А., Любимов Д. Ю. Анализ физико-химических процессов в многоэлементном ЭГК с сообщающимися полостями твэла и межэлектродного зазора // Атомная энергия. — 2008. — Т. 104, вып. 4. — С. 216–224.
Gontar A. S., Gridnev A. A., Lubimov D. Yu. Analiz fiziko-himicheskikh processov v mnogielementnom EGK s soobshushimisya polostyami tvela i mezelectrodnogo zazora [Analysis of physical and chemical processes in a multi-element EGC with communicating cavities of a fuel element and an interelectrode gap] // Nuclear Energy. — 2008. — Vol. 104, No. 4. — P. 216–224 (in Russian).
- Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Потапов А. П., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В. Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2016. — Т. 56, № 6. — С. 89–105.

- Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu., Potapov A. P., Tcheremisin F. G., Shuvalov P. V.* Modelirovaniye techeniy razryazhenogo gaza na osnove resheniya kineticheskogo uravneniya Boltzmana konservativnim proekcionnim metodom [Simulation of rarefied gas flows based on the solution of the Boltzmann kinetic equation by a conservative projection method] // Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2016. — Vol. 56, No. 6. — P. 89–105 (in Russian).
- Додулад О. И., Черемисин Ф. Г.* Расчеты структуры ударной волны в одноатомном газе с контролем точности // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2013. — Т. 53, № 6. — С. 169–187.
- Dodulad O. I., Tcheremisin F. G.* Raschety structure udarnoy volni v odnoatomnom gaze s kontrolem tochnosty [Calculations of the structure of a shock wave in a monatomic gas with accuracy control] // Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2013. — Vol. 53, No. 6. — P. 169–187 (in Russian).
- Клосс Ю. Ю., Мартынов Д. В.* Решение кинетического уравнения Больцмана с помощью тетраэдрических сеток на кластерной архитектуре // Вычислительные методы и программирование. — 2012. — Т. 13. — С. 90–96.
- Kloss Yu. Yu., Martinov D. V.* Reshenie kineticheskogo uravneniya Boltzmana s pomosh'yu tetraedricheskikh setok na klasternoi arkhitekture [Solving the Boltzmann kinetic equation using tetrahedral grids on a cluster architecture] // Computational Methods and Programming. — 2012. — Vol. 13. — P. 90–96 (in Russian).
- Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967. — 440 с.
- Kogan M. N.* Dinamika razryazhenogo gaza [Dynamics of rarefied gas]. — Moscow: Nauka, 1967. — 440 p. (in Russian).
- Коробов Н. М.* Тригонометрические суммы и их приложения. — М.: Наука, 1989.
- Korobov N. M.* Trigonometricheskiye summi i ih prolozheniya [Trigonometric sums and their applications]. — Moscow: Nauka, 1989 (in Russian).
- Любимов Д. Ю., Николаев Ю. В., Шумилов А. А.* Влияние продуктов деления на фазовый состав достехиометрического диоксида урана в тепловыделяющих элементах термоэмиссионных электрогенерирующих каналов // Материаловедение. — 2008. — № 3 (132). — С. 34–42.
- Lubimov D. Yu., Nikolaev Yu. V., Shumilov A. A.* Vlyanie productov deleniya na fazoviy sostav dostehiometricheskogo dioksida urana v teplovidilyayushih elementah termoemissionnih elektrogeneriruyushih kanalov [Influence of fission products on the phase composition of pre-stoichiometric uranium dioxide in fuel elements of thermionic power generating canals] // Materials Science. — 2008. — Vol. 132, No. 3. — P. 34–42 (in Russian).
- Черемисин Ф. Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. — 1997. — Т. 357, № 1. — С. 53–56.
- Tcheremisin F. G.* Konservativniy method vichisleniya integral stolknoveniy Boltzmana [Conservative method for calculating the Boltzmann collision integral] // Doklady RAN. — 1997. — Vol. 357, No. 1. — P. 53–56 (in Russian).
- Черемисин Ф. Г.* Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2006. — Т. 46, № 2. — С. 329–343.
- Tcheremisin F. G.* Resheniye kineticheskogo uravneniya Boltzmana dlya visokoskorostnykh techeniy [Solution of the Boltzmann kinetic equation for high-speed flows] // Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2006. — Vol. 46, No. 2. — P. 329–343 (in Russian).
- Nobuya Miyoshi et al.* Development of ultra-small shock tube for high-energy molecular beam source // 26th Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proc. 1084. — 2009. — P. 557–562.
- Nordsieck A., Hicks B. L.* Monte Carlo evaluation of the Boltzmann collision integral // Rarefied Gas Dynamics. — 1967. — Vol. 1. — P. 695–710.
- Takata S., Sugimoto H., Kosuge S.* Gas separation by means of the Knudsen compressor // European J. Mechanics – B/Fluids. — 2007. — Vol. 26, No. 2. — P. 155–181.