

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ГАЗОДИНАМИКИ С ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКОЙ НА ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРАХ

Б.П. Рыбакин, Е.В. Егорова, Л.И. Стамов

Введение. Нестационарные газодинамические задачи, возникающие на практике, представляют большой интерес. Решение таких задач в трехмерной постановке, с учетом процессов горения и детонации, влияние на газодинамические процессы гравитационных и магнитных полей требует большого количества вычислительных ресурсов. Такие решения необходимы для проектирования перспективных двигателей нового поколения, гиперзвуковых летательных аппаратов, повышения отдачи нефтеносных пластов с помощью процессов управляемого горения. Для моделирования взрывов сверхновых звезд, исследования формирования галактик, моделирования климата и предсказания погоды тоже необходимо проводить большой объем вычислительной работы. Для проведения таких расчетов используются эффективные разностные схемы высокого разрешения, которые позволяют проводить математическое моделирование указанных выше процессов.

Большой интерес, в этой связи вызывает использование новых технологий — графических процессоров (ГП, англ. Graphics Processing Unit, GPU) и технологии CUDA [1]. Применение технологии CUDA позволяет дополнить существующие технологии распараллеливания. Повышение производительности графических процессоров привело к тому, что в настоящее время количество ядер в ГП достигло нескольких тысяч. В новой технологии Kepler количество ядер достигает трех тысяч. На этих ядрах можно запустить несколько тысяч параллельных нитей. Использование графических процессоров дает возможность разрабатывать новые параллельные алгоритмы для проведения интенсивных математических расчетов. Алгоритмы, которые разрабатываются для ГП, требуют особого подхода и не для всех задач удается получить хорошее ускорение. Это связано с тем, что моделирование сложных динамических процессов предъявляет повышенные требования к применяемым разностным схемам. Такие схемы должны максимально точно воспроизводить поведение среды в окрестности больших разрывов, для этого необходимо применять схемы высокого разрешения, в то время как в областях гладкого решения можно применять более экономичные разностные схемы. Кроме того, задачи, в которых исследуются процессы горения и детонации, требуют большое количество дополнительных вычислений. Для хранения переменных, описывающих химические реакции, необходимо дополнительно использовать большое количество быстродействующей памяти — регистровой или разделяемой.

Для решения таких задач использовались разностные схемы, которые сочетают в себе повышенную разрешающую способность в областях малых возмущений и монотонность в областях сильных разрывов. К схемам такого рода принадлежат схемы типа TVD, ENO, WENO, PPM и другие. Такие нелинейные схемы второго порядка точности с ограничением общей вариации позволяют проводить расчеты ударных волн с большим разрешением и предотвращать не физические осцилляции за их фронтами. Расчет газодинамических параметров в сложных задачах является не единственным фактором, требующим применения высокопроизводительных ЭВМ. Для решения задач горения и детонации, изучения влияния гравитационных и магнитных полей требует проведения дополнительных вычислений. Часто время, затраченное на эти дополнительные вычисления, значительно превышает время расчета газодинамической стадии. В данной работе приводятся несколько задач вычислительной газовой динамики с учетом влияния химической кинетики, турбулентности и, для сравнения, приводятся расчеты чисто газодинамических течений. Целью работы является построение параллельных алгоритмов решения таких задач и использование для проведения расчетов графических процессоров. Интерес представляет собой влияние сложности изучаемых алгоритмов на ускорение вычислений.

Задачи химической кинетики. Рассматривается задача нестационарного процесса горения в химически реагирующей газовой среде для изучения переходных процессов горения и детонации в трехмерной декартовой системе координат. В качестве математической модели рассматриваемой задачи используется модель, предложенная в [2-4]. В данной модели не учитывается сила тяжести и передача тепловой энергии излучением, среда считается односкоростной и однотемпературной. Газовая фаза состоит из k компонент, которые могут смешиваться друг с другом. Решение осуществляется с помощью метода разделения по физическим процессам. Расчет конвективной части производится с помощью центрированной схемы класса TVD [5]. Для описания турбулентного движения используется модель класса RANS на основе $k-\varepsilon$ модели. В данной модели реализовывается кинетический механизм в газовой фазе для системы (H_2, N_2, O_2), который основан на работе Мааса и Варнаца [6] и содержит девятнадцать обратимых реакций с девятью компонентами (в качестве нейтральной компоненты выступает азот). В используемом авторами [2-4,6] механизме присутствуют реакции обмена, рекомбинации и диссоциации. Кинетика не содержит выпадающих реакций. Коэффициент скорости прямой реакции определяется по расширенному закону Аррениуса. Коэффициент влияния третьего тела в механизме Мааса-Варнаца определяется одними и теми же

коэффициентами для всех реакций. Метод решения кинетической системы учитывает высокую степень жесткости, используется неявная схема расчета.

Система уравнений, описывающая данную задачу, может быть в записана следующем общем виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot F + \nabla \cdot P + \nabla \cdot D = S,$$

где U — вектор консервативных переменных, F — вектора конвективного потока, P — вектора потока импульса за счет давления, D — вектора диффузионного потока, S — источники. Система дополняется термическим и калорическим уравнениями состояния.

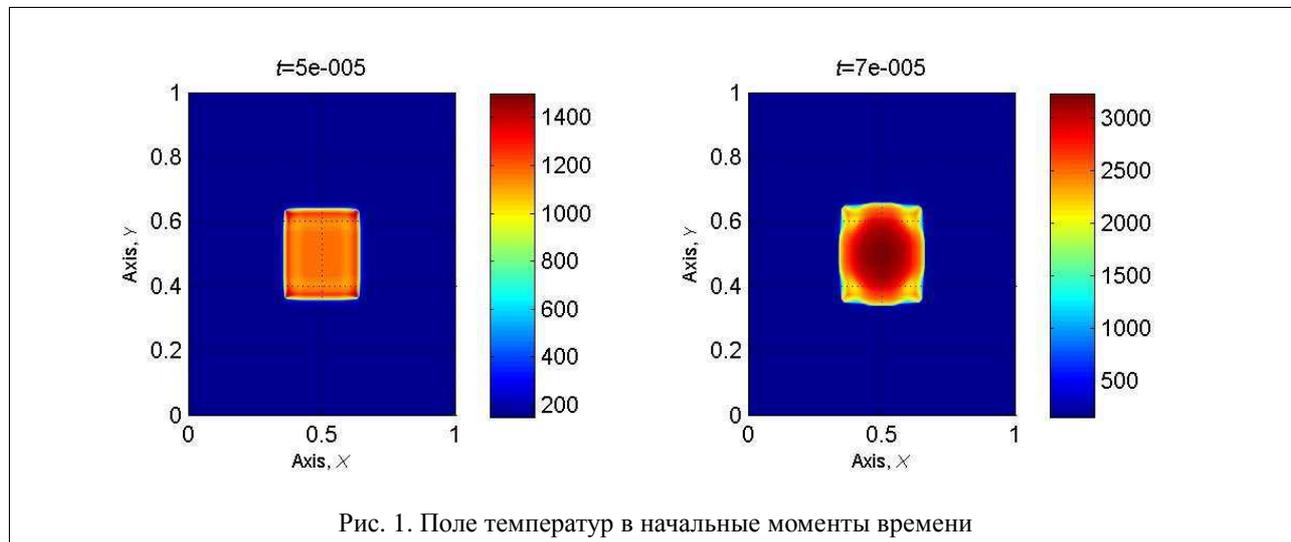


Рис. 1. Поле температур в начальные моменты времени

Результаты численного расчета. В качестве тестовой задачи для проверки рассматриваемого алгоритма химической кинетики данной модели используется следующий пример. Рассматривается квадратная двумерная область S , заполненная смесью идеально перемешанных покоящихся совершенных газов. В центре области производится постоянный подвод энергии. Используются следующие концентрации газов в начальный момент времени (горючего, окислителя и разбавителя) $C_{H_2} : C_{O_2} : C_{N_2} = 3.0 : 2.0 : 3.5$. Суммарная плотность смеси считается постоянной и равна $\rho_0 = 0.3$. Начальная температура смеси равна $T_0 = 150$. Величина подачи тепловой энергии извне $\dot{Q} = 7 \cdot 10^9$. В качестве уравнения состояния используется уравнение состояния для совершенного газа. Расчет производится в области $S : \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$. На границах расчетной области принято условие открытой границы.

При рассмотрении временной эволюции в данной области возникает детонационная волна, распространяющаяся от центра области (места инициирования) к границам, двигаясь по покоящейся смеси газов и инициируя химические реакции горения. Полученные результаты представлены на Рис. 1-3.

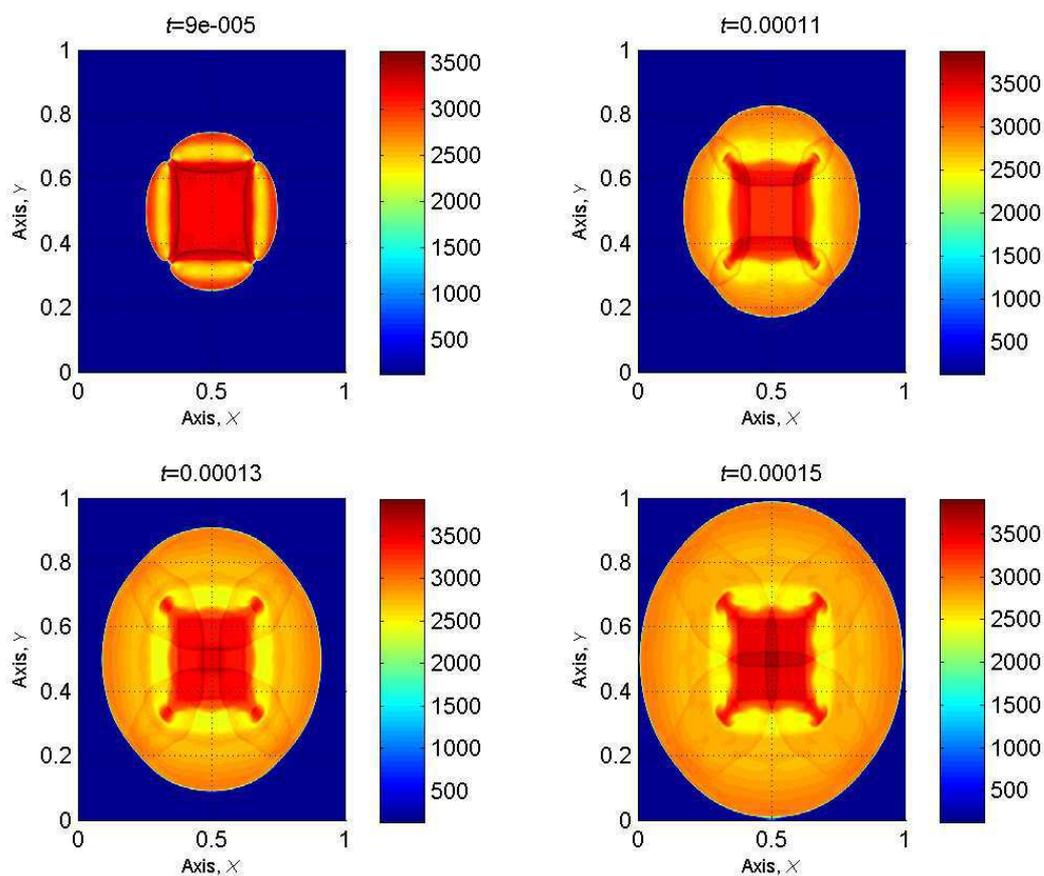
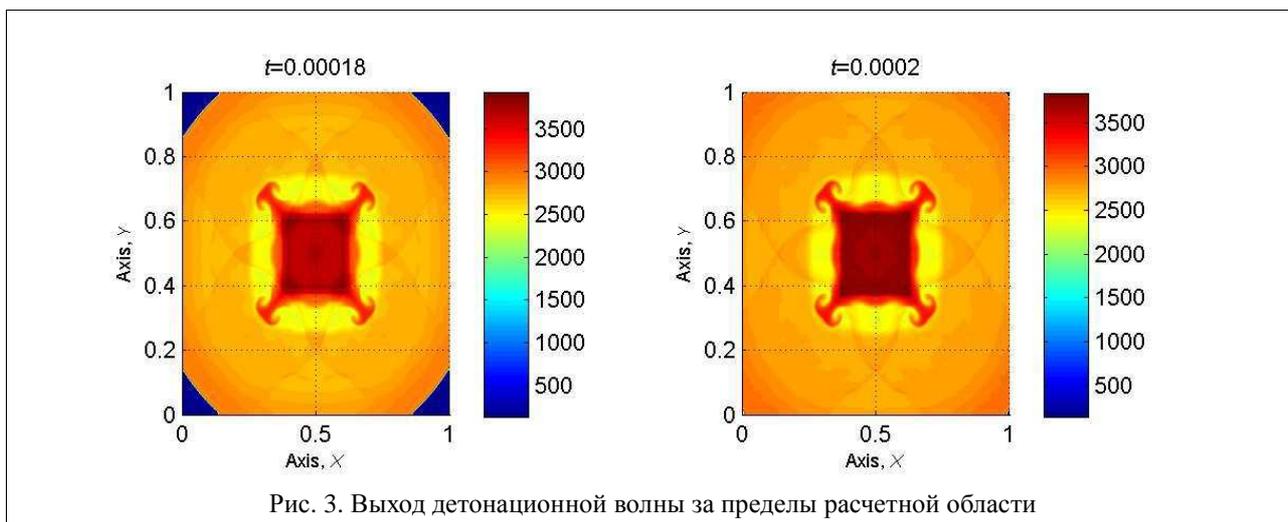


Рис. 2. Развитие процесса детонации

С вычислительной точки зрения алгоритм химической кинетики является весьма ресурсоемким и затратным по времени. В среднем он занимает от 70-80 процентов от всех производимых операций. При таких сложных вычислениях для проведения расчетов с приемлемой точностью необходимо использовать мощные вычислительные системы и комплексы, а также технологии параллельного программирования. Реализованный алгоритм химической кинетики был распараллелен для использования на графических ускорителях с помощью технологии CUDA [1].

Были проведены расчеты перехода процесса горения в детонацию на графической карте фирмы NVIDIA Tesla M2090. Последовательный алгоритм тестировался на процессоре Intel Xeon X5650. Все расчеты производились с двойной точностью. Результаты расчетов приведены на Рис. 1-3 и в Таблице 1. На этих рисунках приведен процесс возникновения химических реакций и их переход в детонацию. Постоянное выделение энергии в центральной области течения приводит к появлению химических реакций Рис.1. Возникает зона повышенной температуры и возникают волны сжатия, которые распространяются как по направлению к границам расчетной области, так и к центру Рис. 2. Отметим появление детонационных волн, которые распространяются как внутрь области, в которой задается подвод тепла, так и во вне этой области. На Рис.2 - Рис.3. приведены результаты расчетов в некоторые моменты времени. Расчеты проводились до момента времени $t = 0.0002$, то есть до того момента, когда возникающие волны достигнут границ и выйдут за пределы расчетной области.

Используемая в расчетах графическая карта Tesla M2090 обладает следующими характеристиками. Пиковая производительность для чисел с одинарной точностью — 1331 ГФлопс, с двойной точностью — 665 ГФлопс, размер памяти GDDR5 – 6 Гбайт, скорость передачи данных — 177 Гбайт/сек, количество ядер — 512. Как видно из полученных результатов, при проведении расчетов с использованием графического процессора наблюдается незначительное ускорение даже для вычислительной области размером 64x64. При увеличении размеров расчетной области наблюдается дальнейший рост производительности (Рис.4.) и выход химических и детонационных процессов на некоторое стационарное значение.

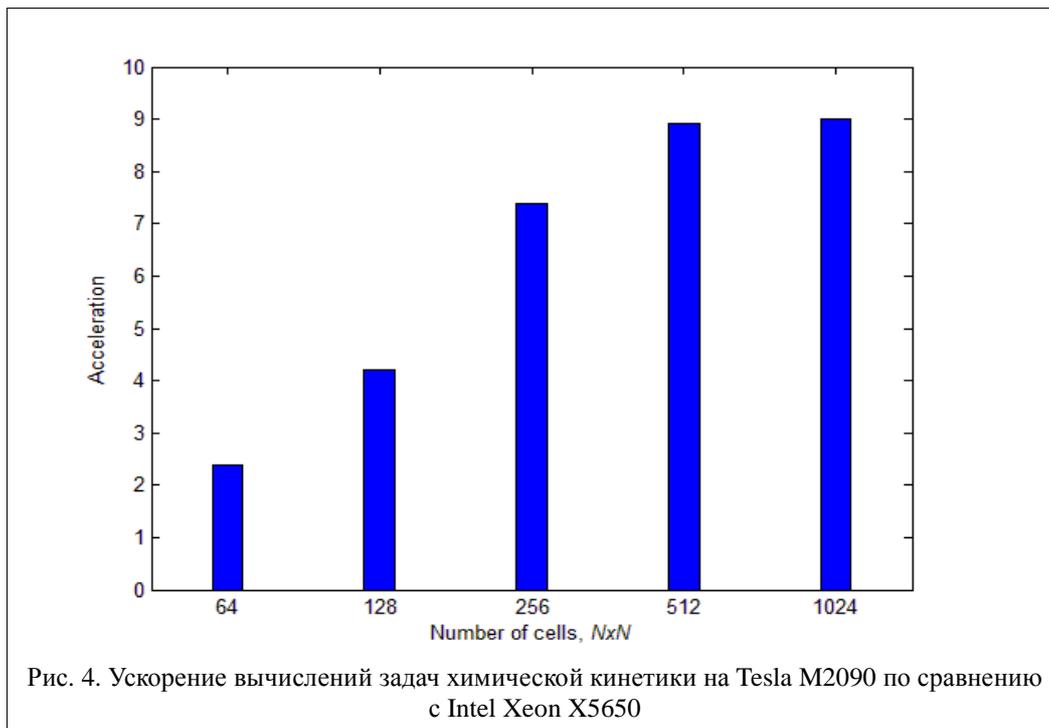


Полученные результаты можно объяснить высокой вычислительной сложностью рассмотренного алгоритма химической кинетики и его структурой. При проведении расчетов химической кинетики, для каждой нити было необходимо 2300 байт памяти ГП, из них большую часть памяти занимали переменные с двойной точностью. В подпрограммах, которые осуществляет расчет газодинамики, требуется 388 байт на одну нить. Исходя из этого, для проведения двумерных тестовых расчетов, оптимальным размером блока оказался блок 8x8 для расчетов химической кинетики и 32x32 для газодинамики. Использование блоков другого размера приводило к увеличению времени расчетов. Так как расчеты химической кинетики требуют повышенной точности все вычисления на графическом ускорителе производились с двойной точностью, что также оказывало существенное влияние на производительность.

Таблица 1. Время расчета для расчетной сетки различного размера.

Размер сетки	Время вычисления, X5650, сек.	Время вычисления, M2090, сек.	Ускорение
64×64	8.69	3.66	2.37
128×128	41.19	9.789	4.21
256×256	317.209	43.01	7.38
512×512	2416.149	271.409	8.90
1024×1024	17981.66	1995.60	9.01

Вычисления с одинарной точностью не проводились, так как расчет химических реакций проводится с величинами, отличающимися на много порядков друг от друга и очень сильно зависящими от точности переменных. В таблице 1 приведено время расчетов с двойной точностью на одном ядре процессора Intel Xeon X5650 (вторая колонка) и на одном графическом процессоре M2090 (третья колонка). На рисунке 4 приведено полученное ускорение. Максимальное ускорение на графическом процессоре достигает 9 раз по сравнению с расчетом на процессоре Intel Xeon X5650.



Задача взаимодействия сильной ударной волны со сферой газа пониженной плотности. Для сравнения приведем результаты расчетов газодинамических задач в двух и трехмерной постановках [7-10] без учета химической кинетики. Можно будет провести сравнение влияния дополнительных вычислений и необходимости хранения большого количества дополнительных переменных на ускорение вычислений.

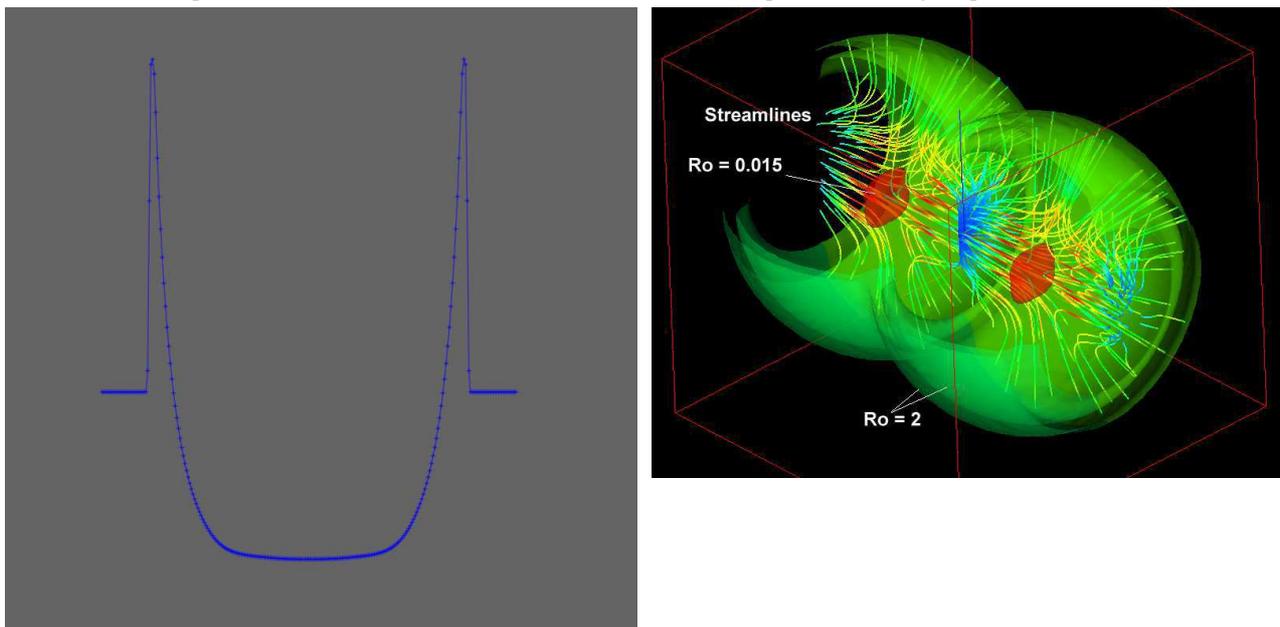


Рис. 5. Результаты тестовых расчетов. Слева сравнение аналитического решения (сплошная линия) задачи Седова с численным расчетом (крестики). Справа - взаимодействие двух ударных волн между собой

Как известно, большой практический интерес представляет собой задача взаимодействия ударной волны с цилиндрической или сферической полостями, заполненными газом с другим значением плотности. Такие задачи характерны для моделирования сгорания топлива, испарения пузырьков и т.д. С другой стороны, такие задачи являются хорошими тестами для проверки различных алгоритмов, методов и программ. С практической точки зрения, такие задачи позволяют изучить процесс образования вихрей при контактном взаимодействии нескольких газов с различными плотностями и уравнениями состояния. Систему уравнений газовой динамики, записанную в консервативной форме можно представить в виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i v_j + P \delta_{ij}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}[(e + P)v_i] = 0.$$

Уравнение состояния использовалось в виде: $e = \rho(1/2v^2 + \varepsilon)$. В приведенной выше системе уравнений (1) ρ – плотность, v – скорость, P – давление, ε – удельная внутренняя энергия, e – полная энергия.

Пусть область $R: \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1\}$ представляет собой параллелепипед, заполненный покоящимся газом с плотностью $\rho_0 = 1.0$ и давлением $p_0 = 1.0$. Внутри этого параллелепипеда находится сферическая область радиуса $r = r_0$, с центром в точке (x_0, y_0, z_0) . Слева, в точке с координатами $x = x_*$, располагается плоская ударная волна, которая движется влево. Начальные условия справа от ударной волны и вне сферического пузырька задаются следующим образом $(p, \rho, u, v, w) = (p_h, \rho_h, u_h, v_h, w_h)$. Внутри сферической полости давление и плотность равны $p = p_b = 1.0$, $\rho = \rho_b = 0.1$. За ударной волной величины определяются с помощью соотношений Ренкина-Гюгонио. Расчетный параллелепипед покрывался прямоугольной сеткой размерами от 64x64x64 до 512x512x512.

Для решения данной задачи разработана математическая модель, алгоритм расчетов и программа, для решения на графических процессорах [9]. На графическом ускорителе проводились расчеты потоков на границах ячеек, вычислялась коррекция потоков и вычислялись ограничители. Архитектуры графических ускорителей используют потоковые мультипроцессоры (англ. Streaming Multiprocessor, SM), которые позволяют осуществлять распараллеливание с помощью технологии ОКМП (одна команда, много потоков; англ. Single Instruction Multiply Thread, SIMT). Это позволяет создавать и управлять десятками тысяч конкурирующих потоков. Потоки можно организовывать в одно-, двух- и трехмерные потоковые блоки, каждый из которых работает на своем ядре. Все потоки выполняются независимо, используя потоковые регистры и общую память. На Рис. 5 приведены результаты тестовых расчетов. Проводилось сравнение результатов численных расчетов с аналитическим решением автоматической задачи Седова о точечном взрыве. Крестиками отмечено численное решение, сплошной линией — аналитическое решение. Справа — решение задачи о взаимодействии двух ударных волн от точечных взрывов в трехмерной постановке. На рис. 6. приведено решение задачи о взаимодействии сильной плоской ударной волны со сферой, заполненной газом с термодинамическими параметрами, отличающимися от параметров газа вне сферы.

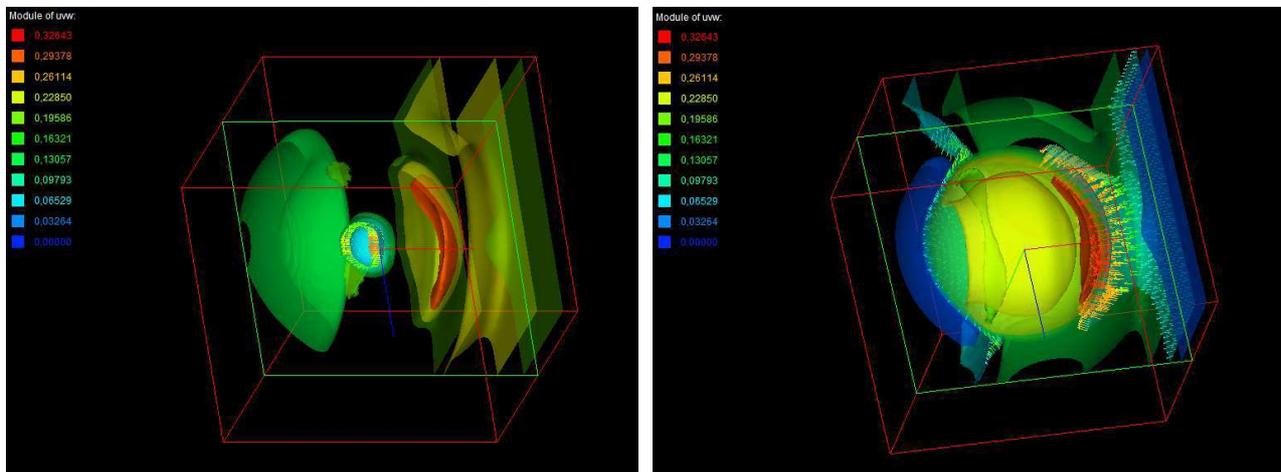


Рис. 6. Распределение плотности (левый рисунок) и энергии (правый рисунок) на момент времени $t=20.057$

Для сравнения расчетов задач газовой динамики с учетом химической кинетики и без химических реакций были проведены расчеты двумерных тестовых задач о взаимодействии ударных волн со сферическими полостями, заполненными газом с другими термодинамическими параметрами.

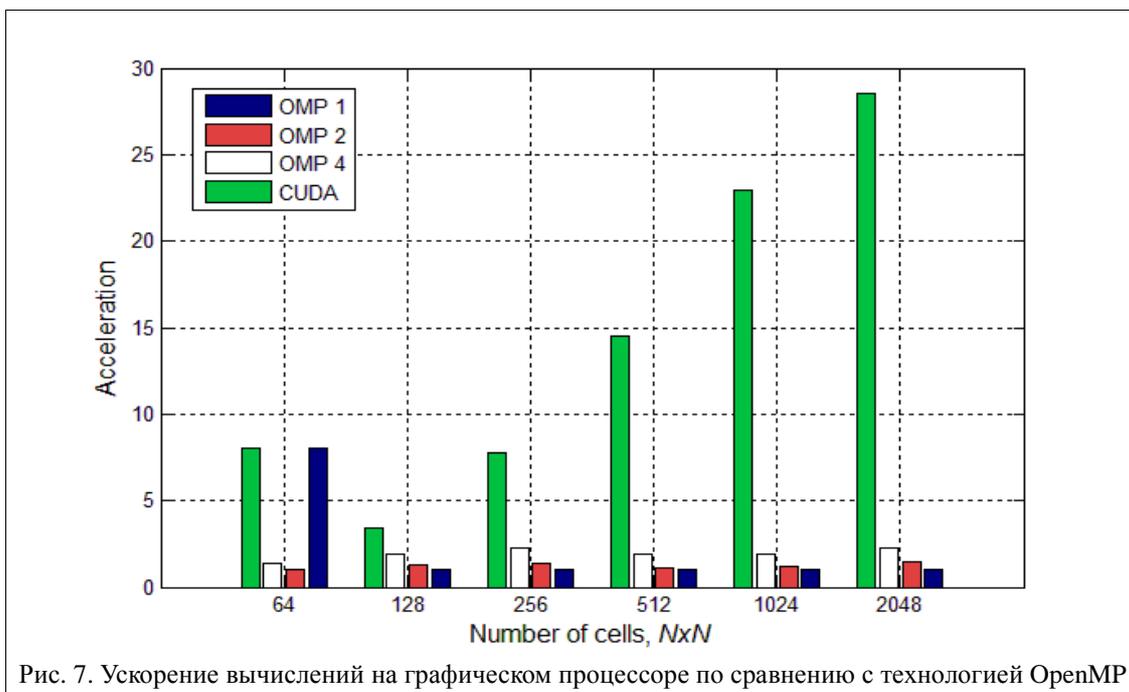


Рис. 7. Ускорение вычислений на графическом процессоре по сравнению с технологией OpenMP

На Рис. 7 приведен график ускорения вычислений задачи двумерной газовой динамики, проведенной на графическом процессоре, по сравнению с расчетами, проведенными с помощью технологии OpenMP на одном, двух и четырех ядрах процессора.

Выводы. Ввиду вычислительной сложности моделирование приведенных выше систем уравнений занимает очень большое время. Поэтому, для решения таких задач, использовалась технология CUDA. Модель программирования CUDA поддерживает несколько уровней абстракций: кооперативную организацию потоковых групп, общую память, барьерную синхронизацию внутри потоковых групп, а также координацию независимых потоков в сетку [8-10]. ГП позволяют одновременно запускать на выполнение десятки тысяч потоков, которые объединяются в варпы (англ. warp, 32 нити). Графический ускоритель имеет свою собственную память, которая, в свою очередь делится на глобальную, локальную, регистровую, память констант и текстур. Все эти виды памяти отличаются друг от друга размерами, скоростью доступа, возможностью записи и считывания или только считывания и т.д. Поэтому необходимо правильно организовать хранение переменных в памяти. Невыполнение этих требований может существенно замедлить выполнение программы. Все это требует другого подхода к проектированию вычислительных алгоритмов и программирования.

В работе показано, что использование графических процессоров позволяет ускорить выполнение расчетов задач газодинамики. Как и следовало ожидать, задачи без учета химической кинетики дают значительно большие ускорения, чем задачи с учетом химических превращений.

В дальнейшем планируется провести систематические расчеты этих задач в трехмерной постановке. Кроме того, планируется использовать возможности нескольких графических процессоров для проведения данных расчетов.

Данная работа выполнена при поддержке грантов: грант №18 Президиума Академии Наук России, грант №11-07-00679 Российского Фонда Поддержки Фундаментальных Исследований.

ЛИТЕРАТУРА:

1. NVIDIA CUDA. Programming Guide. 2011, <http://developer.nvidia.com/cuda-toolkit-40>.
2. Н.Н. Смирнов, В.Ф. Никитин, Ш. Алиари Шурехдели. Переходные режимы распространения волн в метастабильных системах. Физика горения и взрыва, 44, 5 (2008), с. 25-37.
3. N.N. Smirnov, V.F. Nikitin, Yu.G. Philippov. Deflagration to detonation transition in gases in tubes with cavities. Journal of Engineering Physics and Thermophysics, 83, 6 (2010), pp. 1287-1316.
4. N.N. Smirnov, V.F. Nikitin, S. Alyari Shurekhdeli. Investigation of Self-Sustaining Waves in Metastable Systems: Deflagration-to-Detonation Transition. Journal of Propulsion and Power, 25, 3 (2009), pp. 593-608.
5. G.-S. Jiang, E. Tadmor. Nonoscillatory central schemes for multidimensional hyperbolic conservation laws, SIAM J. SCI. COMPUT., 19 (1998), pp. 1892-1917.
6. U. Maas, J. Warnatz, Ignition Processes in Hydrogen-Oxygen Mixtures. Combustion and Flame, 74, 1 (1988), pp. 53-69.

7. Б.П. Рыбакин, Н.И. Шидер. Построение параллельных алгоритмов для решения задач гравитационной газовой динамики. Журнал Вычислительные Методы и Программирование, 11, 2010, стр. 388-394.
8. V. Rybakin. Modeling of 3-D Problems of Gas Dynamics on Multiprocessing Computers and GPU. Elsevier, Computers & Fluids, DOI information: 10.1016/j.compfluid.2012.01.016, 31-JAN-2012.
9. Б.П. Рыбакин, Л.И. Стамов. Использование многопроцессорных вычислительных систем и графических ускорителей для моделирования задач газодинамики // Материалы международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее», г. Новороссийск, 19-24 сентября 2011 г., стр. 84-89.
10. Б.П. Рыбакин, Е.В. Егорова. Решение задач газовой динамики на графических ускорителях // Материалы международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее», г. Новороссийск, 19-24 сентября 2011 г., стр. 326-331.