

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ

Л.И. Стамов

Введение. Многомерные газодинамические задачи с учетом химических реакций представляют большой интерес для моделирования процессов горения и детонации и требуют большого количества вычислительных ресурсов из-за своей высокой сложности. В связи с этим для эффективного решения данных задач необходимо разрабатывать оптимальные алгоритмы и использовать все возможности современной вычислительной техники.

Среди современных вычислительных ресурсов стоит отметить растущую популярность гибридных систем — систем, содержащих наряду с классическими центральными процессорами так называемые графические ускорители (графические процессоры, графические сопроцессоры). Благодаря своей архитектуре графические процессоры позволяют значительно снизить временные затраты при моделировании многих ресурсоемких вычислительных задач. Но для эффективного использования графических сопроцессоров в моделировании необходимо учитывать многие особенности их архитектуры и тонкости работы с ними. Это требует другого подхода к разработке параллельных алгоритмов, по сравнению с «классическими» процессорами.

При исследовании процессов горения и детонации основным вычислительным этапом является решение жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений, которые описывают химическую кинетику. Использование гибридных систем при решении такого класса задач требует учета особенностей данных систем ОДУ, а именно, локализованность протекания интенсивных химических процессов на фронте пламени и непосредственно за ним. Реакции наиболее активно идут в областях повышенной температуры и концентрации веществ. Время расчета в таких точках значительно выше решения систем ОДУ в других областях, причем расположение фронта реакций с течением времени изменяется. Поэтому предполагается проведение некоторой балансировки нагрузки между различными узлами вычислительной системы и использование специальных алгоритмов.

Целью данной работы является поиск оптимальных параллельных алгоритмов для моделирования процессов горения и детонации на системах с гибридными архитектурами, содержащими графические процессоры.

Система основных уравнений. В качестве математической модели, описывающей рассматриваемые процессы, может быть использована следующая система уравнений вида Навье-Стокса [1,2]:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_k \mathbf{v} - D_e \nabla \frac{\rho_k}{\rho} \right) = \dot{\omega}_k,$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \tau) + \nabla p = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{v} + p \mathbf{v} - \lambda_e \nabla h - \mu_e \nabla K - \tau \cdot \mathbf{v}) = \dot{q}.$$

В данной системе используются следующие обозначения: ρ_k - плотность k -й компоненты смеси, $\rho = \sum_k \rho_k$ - суммарная плотность смеси, \mathbf{v} - вектор скорости, p - давление смеси, E - полная энергия смеси, h - энтальпия смеси, K - турбулентная энергия, τ - тензор напряжений, $\dot{\omega}_k$ - скорость образования единицы массы k -го компонента смеси в химических реакциях; D_e, λ_e, μ_e - коэффициенты переноса; \dot{q} - приток тепла. Система также дополняется уравнениями для моделирования турбулентности, например, ка-эпсилон ($k - \varepsilon$) или ка-омега ($k - \omega$) модели турбулентности. В качестве уравнения состояния используется уравнение состояния совершенного газа:

$$p = RT \sum_k \frac{\rho_k}{W_k},$$

где W_k - молярная масса k -го компонента смеси, R - универсальная газовая постоянная.

Задача химической кинетики. Как известно, при моделировании процессов горения и детонации основное время вычислений занимают этапы химических реакций (при использовании сложных химических механизмов время их расчета может превышать 90% времени всех вычислений). В связи с этим интерес представляет возможность как можно эффективнее использовать все имеющиеся ресурсы при проведении данного этапа вычислений.

В качестве тестовой задачи для проведения исследований распараллеливания алгоритма решения химической кинетики на графических процессорах рассматривалась следующая задача, моделирующая нестационарные процессы горения в химически реагирующей однородной газовой среде. Математическая модель данной задачи была рассмотрена выше. Газовая фаза состоит из k компонент, свободно смешивающихся друг с другом. Все компоненты являются совершенными газами. В расчетах использовался элементарный кинетический механизм горения кислородно-воздушной смеси Мааса и Варнаца [3]. Данный механизм содержит 9 компонент (азот выступает в качестве нейтральной компоненты) и 19 обратимых реакций.

Решение системы осуществлялось разделением по физическим процессам. Для решения получившейся жесткой системы кинетических уравнений использовался неявный метод, предложенный в работах [1,2]. Также был рассмотрен четырех стадийный метод типа Розенброка [4]. Вычисление газодинамической части осуществлялось с помощью централизованной схемы с ограничением общей вариации [5].

Задача была рассмотрена в квадратной двумерной области $S: \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$, заполненной смесью идеально перемешанных покоящихся совершенных газов. В центре области производился подвод тепла, для зажигания смеси. В тестовых расчетах использовались следующие доли молярных концентрации газов в области в начальный момент времени (стехиометрическая смесь с воздухом) $C_{H_2} : C_{O_2} : C_{N_2} = 2.0 : 1.0 : 4.0$. Начальное давление в смеси $p = 1$ атм. Начальная температура смеси была равна $T_0 = 300$ К. Величина подачи тепловой энергии извне $\dot{Q} = 7 \cdot 10^9$ Вт на единицу объема. В качестве уравнения состояния используется уравнение состояния для совершенного газа. На границах расчетной области принято условие открытой границы. При тестировании методов решения кинетических механизмов использовались параметры смеси отличные от указанных выше.

Параллельная реализация. Для использования в расчетах графических процессоров была использована технология CUDA [6,7]. Данная технология позволяет проводить вычисления на графических процессорах фирмы Nvidia.

Алгоритм был разбит на две части. Одна часть относится к описанию газодинамических процессов, другая к химическим. Распараллеливание проводилось по геометрическому принципу. Параллельная версия газодинамической части аналогична используемой в [8]. На химическом этапе происходящие процессы не зависят от пространственных градиентов, поэтому в каждом узле расчетной сетки вычисления зависят только от величин, расположенных в этом же узле, и могут выполняться независимо от соседних ячеек. Также из-за высокой сложности в моделировании химических процессов для получения допустимого результата все расчеты проводились с двойной точностью. При этом распределением вычислениями занимается центральный процессор, как и подсчетом некоторых контрольных данных.

Вычисления проводились на графических процессорах Tesla M2090 и Tesla K20. Последовательный алгоритм тестировался на процессоре Intel Xeon X5650. Результаты времени расчетов представлены на Рис. 1. Как видно из полученных результатов, при увеличении числа вычислительных узлов наблюдается увеличение ускорения на графических процессорах и тенденция к выходу к некоторому стационарному значению. Как и следовало ожидать, более мощная графическая карта Tesla K20 дает большее ускорение. Максимальное ускорение, полученное на данных ускорителях составляет 12 и 19 раз для карт M2090 и K20 соответственно. Данный результат можно трактовать высокой сложностью алгоритма решения системы химических уравнений в сочетании с выбранным методом распараллеливания. Для выбора метода распараллеливания по химическим реакциям необходимо использовать более сложные кинетические механизмы, так как в рассмотренном элементарном механизме данным способом получить существенного ускорения не удалось из-за относительно малого числа реакций и компонент.

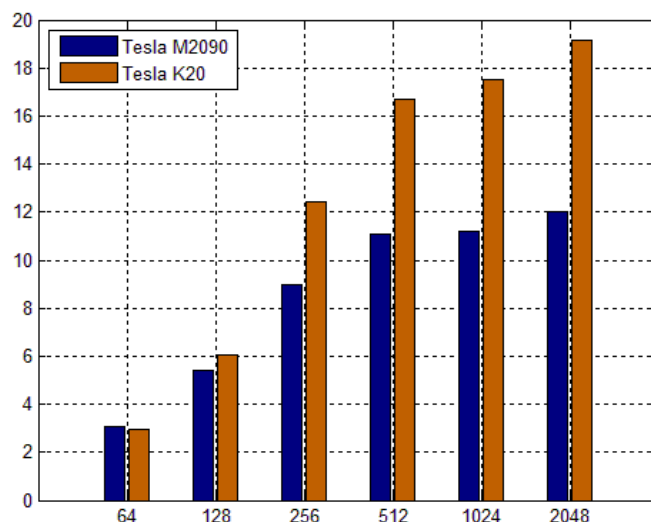


Рис. 1. Ускорение вычислений задач химической кинетики на графических процессорах Tesla M2090 и Tesla K20 по сравнению с центральным процессором Intel Xeon X5650 для различных размеров расчетной сетки

Расчеты на графических процессорах проводились для различного размера расчетных блоков. Как на карте Tesla M2090, так и на Tesla K20 одним из самых оптимальных оказался блок размером 8 на 4 элемента.

Выводы. В данной работе был рассмотрен и протестирован параллельный алгоритм расчета задач химической кинетики на графических процессорах. Полученные результаты показывают, что рассмотренные методы решения системы кинетических уравнений и распараллеливания обладают высокой вычислительной сложностью для архитектуры графических процессоров и требуют дополнительной оптимизации для существенного ускорения расчетов на данных вычислительных устройствах.

В дальнейшем планируется провести адаптацию методов типа Розенброка для использования в расчетах на графических процессорах и попытаться сократить количество памяти, используемой под локальные переменные на этапе химического шага. Также планируется в дальнейшем использовать динамическое перераспределение расчетных ячеек между вычислительными блоками графического процессора, что может существенно повысить производительность, и исключить некоторые этапы расчета на центральном процессоре, используя преимущества новой архитектуры графических процессоров Kepler.

Данная работа выполнена при поддержке программы №18 Президиума Российской Академии Наук, гранта №11-07-00679 Российского Фонда Поддержки Фундаментальных Исследований.

ЛИТЕРАТУРА:

1. 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.
2. N.N. Smirnov, V.F. Nikitin, Yu.G. Phylippov. Deflagration to detonation transition in gases in tubes with cavities. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 83, 6 (2010), pp. 1287-1316.
3. U. Maas, J. Warnatz, Ignition Processes in Hydrogen-Oxygen Mixtures. *Combustion and Flame*, 74, 1 (1988), pp. 53-69.
4. Э. Хайрер, Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. Пер. с англ. - М.: Мир, 1999.
5. G.-S. Jiang, E. Tadmor. Nonoscillatory central schemes for multidimensional hyperbolic conservation laws, *SIAM J. SCI. COMPUT.*, 19 (1998), pp. 1892-1917.
6. NVIDIA CUDA. Programming Guide. 2013, <http://developer.nvidia.com/cuda-downloads>.
7. Б.П. Рыбакин. Параллельное программирование для графических ускорителей. -М.: НИИСИ РАН, 2011.
8. Б.П. Рыбакин, Е.В. Егорова, Л.И. Стамов. Решение задач газодинамики с химической кинетикой на графических процессорах // *Материалы международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений»*, г. Новороссийск, 17-22 сентября 2012 г., стр. 483-490.