

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ НА ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Л.И. Стамов^{1,2}, Е.В. Михальченко^{1,2}

¹ НИИСИ РАН

² МГУ имени М.В. Ломоносова

Введение. В связи с наличием большого количества технических проблем в различных областях современной деятельности и появления широкого круга сложных и ресурсоемких задач с каждым годом возрастает потребность в мощных вычислительных комплексах, способных проводить достаточно точное и качественно корректное моделирование. Количество таких систем растет ежегодно, как и вычислительная мощность существующих. Одним из способов увеличения производительности этих комплексов является присутствие помимо «классических» центральных процессоров дополнительных вычислительных устройств, так называемых сопроцессоров. Одним из видов сопроцессоров являются графические ускорители. Такие системы также называют гибридными системами. Они обладают рядом особенностей и позволяют значительно увеличить скорость вычислительного эксперимента в некоторых задачах при правильном подходе к разработке численных алгоритмов.

Для проведения моделирования на системах такого рода существует ряд технологий параллельного программирования [1]. Такими технологиями являются технология OpenMP для систем с общей памятью и технология MPI для систем с распределенной памятью. Для работы с графическими сопроцессорами также применяются технологии OpenCL и CUDA [2,3].

Одними из актуальных и весьма сложными, с вычислительной точки зрения, задачами, возникшими в современном мире, являются задачи горения и детонации в химически активных смесях, а также переходы между этими режимами. Задачи такого типа важны, например, при создании более эффективных двигателей внутреннего сгорания и разработке двигателей нового поколения, основанных на более выгодном детонационном сжигании топлива — детонационных двигателях (импульсные детонационные двигатели и двигатель с вращающейся детонационной волной) [4]. Изучение переходных процессов весьма важно при принятии мер по предотвращению перехода горения в детонацию в случае возгорания смеси газов, например, при возникновении взрывов в шахтах. Также важной отраслью применения рассматриваемых процессов является использование управляемого горения для повышения отдачи нефтеносных пластов.

В данной работе рассматривается задача нестационарного процесса горения в химически реагирующей газовой смеси, и разрабатываются параллельные алгоритмы решения данной задачи на гибридных системах с графическими процессорами.

Система основных уравнений. В качестве математической модели, описывающей рассматриваемые процессы, может быть использована следующая система уравнений [5,6]:

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

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

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

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. 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. Основной вычислительно сложный этап при моделировании задач горения и детонации является учет уравнений химической кинетики, который, в зависимости от применяемого кинетического механизма и протекающих процессов, может занимать приблизительно 90% и более времени всех вычислений. В связи с этим основной задачей является максимально ускорить время моделирования данной части расчетов с использованием современных технологий параллельного программирования и графических процессоров, как одного из перспективных средств повышения производительности.

Для моделирования протекания химических реакций была выбрана модель нестационарного процесса горения в химически реагирующей однородной газовой среде, рассмотренная в работах [5,6]. В ней 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 [7]. Данный механизм содержит девять компонент (азот выступает в качестве нейтральной компоненты) и девятнадцать обратимых реакций.

Решение рассмотренной системы дифференциальных уравнений осуществлялось разделением по физическим процессам [6]. Система была разбита на газодинамическую и химическую части. Для моделирования химической стадии была получена жесткая система обыкновенных дифференциальных уравнений. Решение данной системы осуществлялось с помощью четырех стадийного метода типа Розенброка [8]. Данный метод показал хорошую устойчивость и достаточную точность при проведении вычислений. На следующем этапе работы алгоритма происходил расчет газодинамической части уравнений. Для решения данной части системы уравнений были рассмотрены ряд разностных схем высокого порядка точности — кусочно-параболический метод, предложенный Коллелой и Вудвардом [9] и центрированная схема с ограничением общей вариации, рассмотренной в работах Джанга и Тедмора [10].

При составлении алгоритма было проведено тестирование как каждой стадии в отдельности, так и совместно с помощью оценки скорости распространения детонационной волны. Для проверки распараллеливаемости полученного алгоритма на системах с гибридной архитектурой была рассмотрена тонкая трубка, заполненная кислород-водородной и кислород-воздушной стехиометрической смесью идеально перемешанных покоящихся газов в двумерной постановке. Область имела следующие размеры $S: \{0 \leq x \leq 0.02, 0 \leq y \leq 0.5\}$ в метрах. На границах области использовались условия адиабатической стенки. В левой части трубки производился равномерный подвод тепла по всей границе для поджигания смеси. В тестовых расчетах использовались следующие доли молярных концентрации газов в области в начальный момент времени $C_{H_2} : C_{O_2} : C_{N_2} = 2.0 : 1.0 : 3.5$ для стехиометрической смеси с воздухом и $C_{H_2} : C_{O_2} : C_{N_2} = 2.0 : 1.0 : 0.0$ для стехиометрической смеси с кислородом. Начальное давление в области $p = 1$ атм. Начальная температура смеси была равна $T_0 = 300$ К. Величина подачи тепловой энергии извне $\dot{Q} = 2.0 \cdot 10^{10}$ Вт на единицу объема. Энергия подавалась в течении $t_q = 50$ микросекунд. Этого было достаточно для возникновения детонационной волны, движущейся к правому концу трубки. В качестве уравнения состояния использовалось уравнение состояния для совершенного газа. Результаты расчетов представлены на Рис. 1. Видно, что образуется пересжатая детонационная волна (сильная детонация), которая постепенно ослабляется, и давление на фронте приближается к давлению в волне Чепмена-Жуге [4].

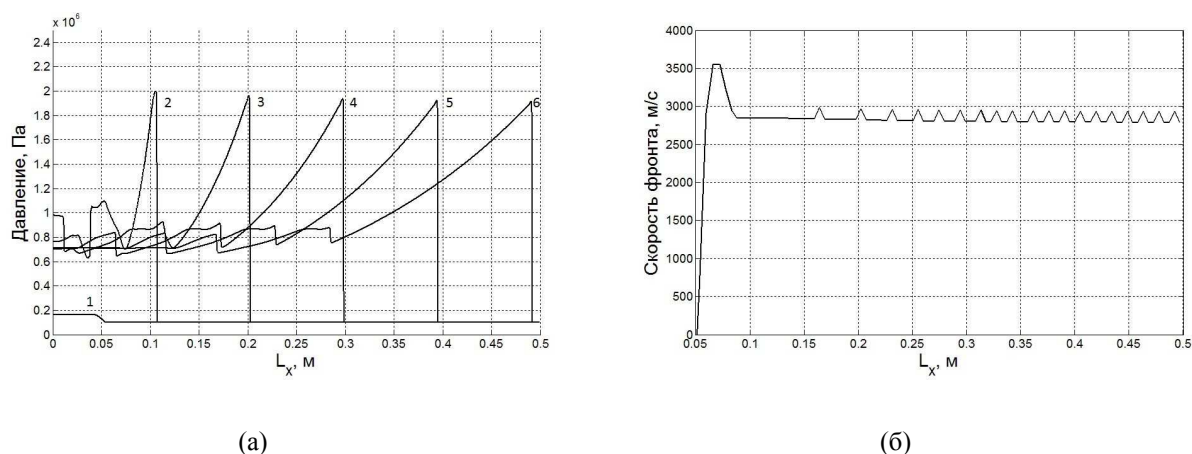


Рис. 1. Расчетные профили давления по центральному срезу трубки в различные моменты времени: 1 — 7.68 мкс, 2 - 62.12 мкс, 3 - 95.63 мкс, 4 - 129.43 мкс, 5 - 163.4 мкс, 6 - 197.42 мкс (а); Изменение скорости фронта горения вдоль трубы для кислородо-водородной смеси (б).

Параллельный алгоритм. Для проведения расчетов на графических процессорах была использована технология CUDA [6,7]. Данная технология позволяет проводить вычисления на графических ускорителях фирмы Nvidia.

Общий принцип действия алгоритма схож с рассмотренным в работе [11,12]. Алгоритм был разбит на две части. Одна часть относится к описанию газодинамических процессов, другая к химическим. Распараллеливание проводилось по геометрическому принципу. При этом все основные расчеты производились на графическом процессоре. Центральный процессор занимался запуском ядер на графическом и расчетом временного шага. Геометрический принцип распараллеливания был выбран в связи с тем, что 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. Для достижения необходимой точности и в связи с чрезвычайной чувствительностью химического шага все вычисления производились с двойной точностью. При этом стоит отметить чрезвычайно высокую сложность метода решения химического шага, что создает высокую вычислительную нагрузку для «легких» ядер графического ускорителя и негативно сказывается на производительности. В тоже время распараллеливание по другому принципу, например, по кинетическому механизму, с нашей точки зрения, не является рациональным из-за малого числа компонент и реакций.

Вычисления проводились на графических процессорах Tesla M2090 и Tesla K20x. Последовательный алгоритм тестировался на процессоре Intel Xeon E5-2650. Результаты времени расчетов представлены на Рис.2. Как видно из полученных результатов, при увеличении числа вычислительных узлов наблюдается увеличение ускорения на графическом процессоре и выходу на некоторое стационарное значение. Максимальное ускорение, полученное на данном ускорителе более девятнадцати раз на сравнение с однопоточной версией алгоритма. Данный результат можно трактовать высокой сложностью алгоритма решения системы химических уравнений в сочетании с выбранным методом распараллеливания. Как уже говорилось ранее, для получения хорошей производительности при выборе метода распараллеливания по химическим реакциям необходимо использовать более сложные кинетические механизмы с десятками и более реакций и компонент.

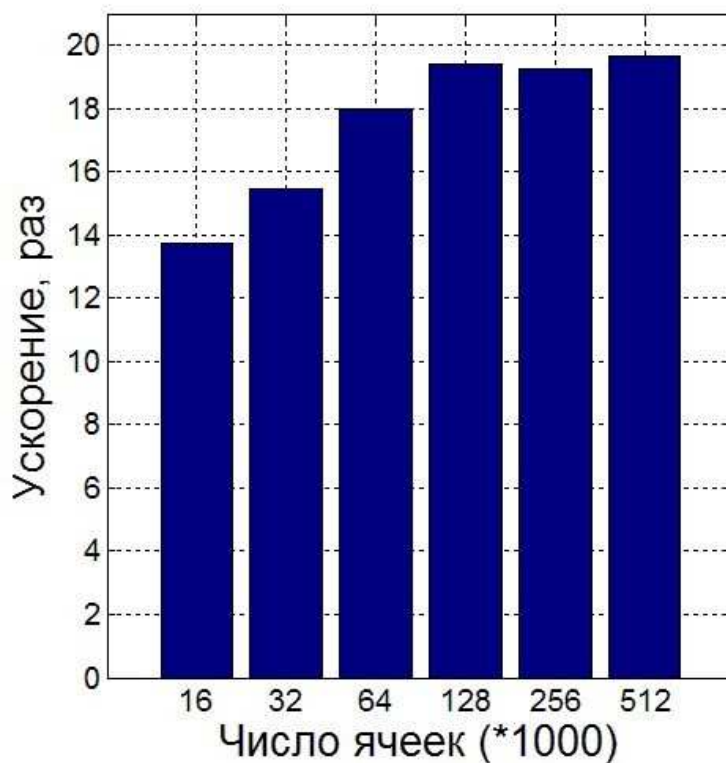


Рис. 2. Ускорение вычислений задач химической кинетики на графическом процессоре Tesla K20x по сравнению с центральным процессором Intel Xeon E5-2650 для различных размеров расчетной сетки. Указано суммарное число ячеек.

При проведении расчетов использовался различный размер расчетных блоков. Оптимальным оказался блок размером 64 на 16 элементов.

Выводы.

В данной работе был рассмотрен и протестирован параллельный алгоритм расчета задач с учетом химической кинетики на графических процессорах. Результаты работы данного алгоритма показывают, что рассмотренные методы решения системы кинетических уравнений и распараллеливания обладают еще большей вычислительной сложностью для архитектуры графических процессоров, чем рассмотренные в предыдущих работах. Оптимизация и поиск наилучшего алгоритма для решения задач данного типа продолжается. Одним из

оптимальных размеров вычислительного блока для проведения моделирования на графическом процессоре был получен блок из 64 на 16 элементов. Полученное ускорение в 19 раз уже позволяет значительно сократить время проведения моделирования, что весьма существенно при проведении расчетов задач горения и детонации.

В дальнейшем планируется разбить на блоки сам алгоритм типа Розенброка, что может упростить его сложность для вычислительных ядер сопроцессора и повысить производительность. Также планируется разработанный алгоритм адаптировать под системы с несколькими ускорителями. Возможно, использование других алгоритмов решения жестких систем дифференциальных алгоритмов может лучше «лечь» на архитектуру графических процессор, поэтому исследование других методов также является приоритетным направлением дальнейших работ.

Данная работа выполнена при поддержке программы №18 Президиума Российской Академии Наук, гранта №13-01-12019 Российского Фонда Поддержки Фундаментальных Исследований.

ЛИТЕРАТУРА:

1. А.С. Антонов. Технологии параллельного программирования MPI и OpenMP: Учеб. пособие. Предисл.: В.А.Садовничий. - М.: Издательство Московского университета, 2012.
2. NVIDIA CUDA. Programming Guide. 2014, <http://developer.nvidia.com/cuda-downloads>.
3. Б.П. Рыбакин. Параллельное программирование для графических ускорителей. -М.: НИИСИ РАН, 2011.
4. Импульсные детонационные двигатели. Под редакцией Фролова С. М. -М.:Торус пресс, 2006.
5. 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.
6. 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.
7. U. Maas, J. Warnatz, Ignition Processes in Hydrogen-Oxygen Mixtures. Combustion and Flame, **74**, 1 (1988), pp. 53-69.
8. Э. Хайрер, Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. Пер. с англ. - М.: Мир, 1999.
9. P. Colella and Paul R. Woodward. The Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas-Dynamical Simulations, Journal of Computational Physics, **54** (1984), pp. 174-201.
10. G.-S. Jiang, E. Tadmor. Nonoscillatory central schemes for multidimensional hyperbolic conservation laws, SIAM J. SCI. COMPUT., **19** (1998), pp. 1892-1917.
11. 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.
12. Л.И. Стамов. Использование графических ускорителей для моделирования процессов горения и детонации // Материалы международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма», г. Новороссийск, 23-28 сентября 2013 г., стр. 127-129.