

УДК 517.958+532

## ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ С УЧЕТОМ УРАВНЕНИЙ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Б. П. Рыбакин<sup>1</sup>, Е. В. Егорова<sup>2</sup>, Л. И. Стамов<sup>2</sup>

Представлены результаты расчетов двухмерных и трехмерных задач газодинамики с учетом уравнений химической кинетики. Решение системы газодинамических уравнений проводилось с помощью схем высокой разрешающей возможности типа TVD (Total Variation Diminishing). Расчеты, обсуждаемые в настоящей статье, проводились на гибридной системе, содержащей помимо центральных процессоров графические ускорители. Проведенные расчеты показывают хорошее распараллеливание газодинамических задач и задач химической кинетики на системах с графическими сопроцессорами. Работа выполнена при поддержке Президиума РАН (грант № 18) и РФФИ (грант № 11-07-00679). Статья рекомендована к публикации программным комитетом Международной научной конференции “Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений” (<http://agora.guru.ru/abrau>).

**Ключевые слова:** математическое моделирование, газовая динамика, химическая кинетика, графические ускорители.

**1. Введение.** Нестационарные газодинамические задачи, возникающие на практике, представляют большой интерес. Решение таких задач в трехмерной постановке с учетом процессов горения и детонации требует значительного количества вычислительных ресурсов вследствие влияния гравитационных и магнитных полей на газодинамические процессы. Указанные задачи исключительно важны для проектирования перспективных двигателей нового поколения и гиперзвуковых летательных аппаратов, повышения отдачи нефтеносных пластов с помощью процессов управляемого горения и др. Для моделирования взрывов сверхновых звезд, исследования формирования галактик, моделирования климата и предсказания погоды также необходимо проводить большой объем вычислительной работы. При проведении таких расчетов используются эффективные разностные схемы высокого разрешения, которые позволяют проводить математическое моделирование указанных выше процессов с большой степенью точности.

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 методы распараллеливания. Повышение производительности графических процессоров привело к тому, что в настоящее время количество ядер в ГП достигло нескольких тысяч. В новой архитектуре Kepler количество ядер достигает трех тысяч. На этих ядрах можно запустить несколько десятков 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 удастся 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 большого количества дополнительных вычислений. Для хранения переменных, описывающих химические реакции, необходимо дополнительно использовать значительные объемы быстродействующей памяти — регистровой или разделяемой [2].

Для решения таких задач используются разностные схемы, которые сочетают в себе повышенную разрешающую способность в областях малых возмущений и монотонность в областях сильных разрывов.

<sup>1</sup> Научно-исследовательский институт системных исследований РАН (НИИСИ РАН), Нахимовский пр-т, д. 36, корп. 1, 117218, Москва; Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, механико-математический факультет, Ленинские горы, 119899, Москва; вед. науч. сотр., профессор, e-mail: rybakin@vip.niisi.ru

<sup>2</sup> Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, механико-математический факультет, Ленинские горы, 119899, Москва; Егорова Е. В., аспирант, e-mail: vi-velena@rambler.ru; Стамов Л. И., аспирант, e-mail: LyubenStamov@mail.ru

К схемам такого рода принадлежат схемы типа TVD (Total Variation Diminishing), ENO (Essentially Non-Oscillatory), WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory), PPM (Piecewise Parabolic Method) и ряд других схем. Такие нелинейные схемы высокого порядка точности с ограничением общей вариации позволяют проводить расчеты ударных волн с большим разрешением и предотвращать нефизические 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 требуется проведение дополнительных вычислений. Часто время, затраченное на эти дополнительные вычисления, значительно превышает время расчета газодинамической стадии. В настоящей статье рассматриваются несколько задач вычислительной газовой динамики с учетом влияния химической кинетики и 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. Кроме того, в работе приведено исследование влияния сложности методов на полученное ускорение.

**2. Задачи химической кинетики.** Для изучения переходных процессов горения и детонации в трехмерной декартовой системе координат рассмотрим задачу нестационарного процесса горения в химически реагирующей газовой среде. В качестве математической модели рассматриваемой задачи используется модель, предложенная в [3–5]. В данной модели не учитывается сила тяжести и передача тепловой энергии излучением, среда считается односкоростной и однотемпературной. Газовая фаза состоит из  $k$  компонентов, которые могут смешиваться друг с другом. Решение осуществляется с помощью метода разделения по физическим процессам. Расчет конвективной части производится с помощью централизованной схемы класса TVD [6]. Для описания турбулентного движения используется модель класса RANS (Reynolds-Averaged Navier–Stokes) на основе ка-эпсилон ( $k - \epsilon$ ) модели. В данной модели реализовывается кинетический механизм [7] в газовой фазе для системы ( $H_2, N_2, O_2$ ), который содержит девятнадцать обратимых реакций с девятью компонентами (в качестве нейтральной компоненты выступает азот). В используемом авторами [3–5, 7] механизме и методе 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. Для учета высокой степени жесткости кинетической системы уравнений используется неявная схема расчета.

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

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

Здесь  $\mathbf{U}$  — вектор консервативных переменных,  $\mathbf{F}$  — векторы конвективного потока,  $\mathbf{P}$  — векторы потока импульса за счет давления,  $\mathbf{D}$  — векторы диффузионного потока и  $\mathbf{S}$  — источниковые члены. Система дополняется термическим и калорическим уравнениями состояния.

**3. Результаты численного расчета.** В качестве тестовой задачи для проверки рассматриваемого алгоритма химической кинетики рассмотрим следующий пример. Пусть расчетная область представляет собой квадрат  $R$ , заполненный смесью идеально перемешанных покоящихся совершенных газов. В центре расчетной области осуществляется подвод энергии для поджигания смеси. Концентрации газов, используемые в начальный момент времени (горючего, окислителя и разбавителя), находятся в следующей пропорции:  $C_{H_2} : C_{O_2} : C_{N_2} = 3.0 : 2.0 : 3.5$ . Суммарная плотность смеси равна  $\rho_0 = 0.3$ . Начальная температура смеси равна  $T_0 = 300$  К. Величина подачи тепловой энергии извне равна  $\dot{Q} = 7 \times 10^9$ . В качестве уравнения состояния используется уравнение состояния для совершенного газа. Расчет производится в области  $R : \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$ . На границах расчетной области приняты условия открытой границы.

При рассмотрении временной эволюции в этой области возникает детонационная волна, распространяющаяся от центра области (места инициирования) к границам, которая двигается по покоящейся смеси газов и инициирует химические реакции горения. Полученные результаты представлены на рис. 1 и 2.

С вычислительной точки зрения алгоритм химической кинетики является весьма ресурсоемким и затратным по времени. В среднем он занимает 70–80% 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 графическом ускорителе фирмы NVIDIA Tesla M2090. Последовательный алгоритм тестировался на процессоре Intel Xeon X5650. Все рас-

четы проводились с двойной точностью. Результаты расчетов приведены на рис. 1, 2 и в таблице. На этих рисунках приведен процесс возникновения химических реакций и их переход в детонацию. 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. Отметим появление детонационных волн, которые распространяются как внутрь области, в которой задается подвод тепла, так и вне этой области. На рис. 2 приведены результаты расчетов в последовательные моменты времени. Расчеты проводились до момента времени  $t = 0.0002$ , т.е. до того момента, когда возникающие волны достигнут границ и выйдут за пределы расчетной области.

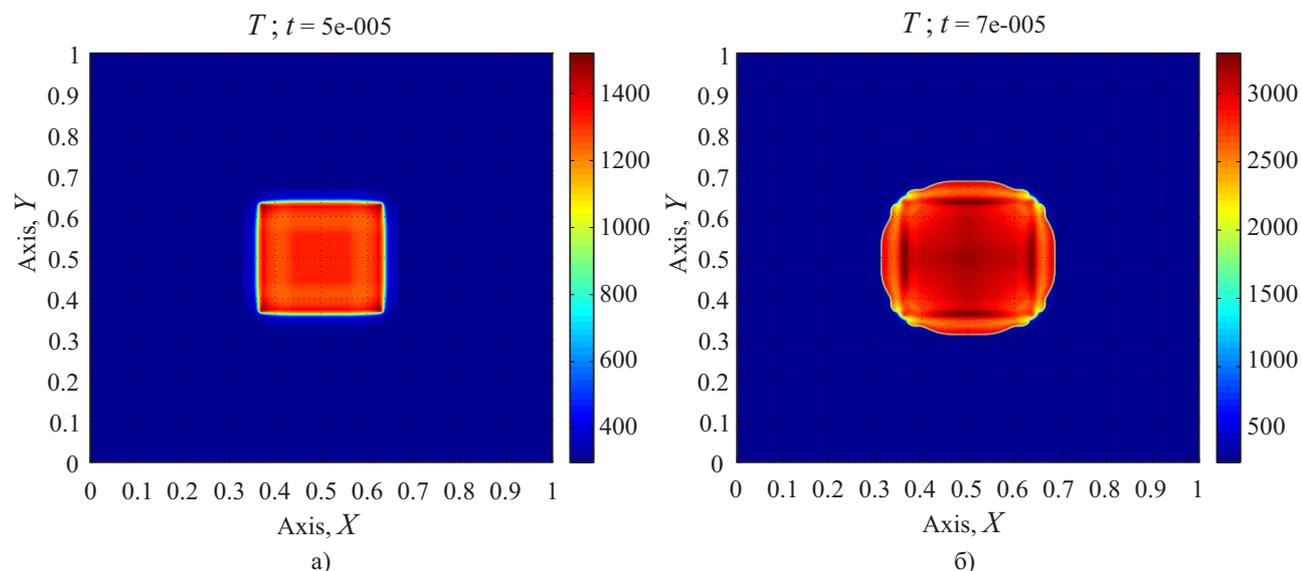


Рис. 1. Поле температур в начальные моменты времени

Используемый в расчетах графический ускоритель 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 следует из полученных результатов, при проведении расчетов с использованием графического процессора наблюдается незначительное ускорение даже для сравнительно небольшой вычислительной области размером  $64 \times 64$  элементов. При увеличении размеров расчетной области наблюдается рост производительности (рис. 3) и выход времени расчета 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 осуществляют расчет газодинамики, требуется 388 байт на одну нить. Исходя из этого, для проведения двумерных тестовых расчетов оптимальным размером блоков оказался блок из  $8 \times 4$  нитей. 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.

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 приведено время расчетов с двойной точностью на одном ядре процессора Intel Xeon X5650 (вторая колонка) и на одном графическом процессоре M2090 (третья колонка). На рис. 3 приведено полученное ускорение. Максимальное ускорение на графическом процессоре достигает 9 раз по сравнению с расчетом на процессоре Intel Xeon X5650.

#### 4. Задача взаимодействия сильной ударной волны со сферой газа пониженной плотности.

Для сравнения приведем результаты расчетов газодинамических задач в двух- и трехмерной постановках [8–11] без учета уравнений химической кинетики. Можно будет провести сравнение влияния дополнительных вычислений и необходимости хранения большого количества вспомогательных переменных на

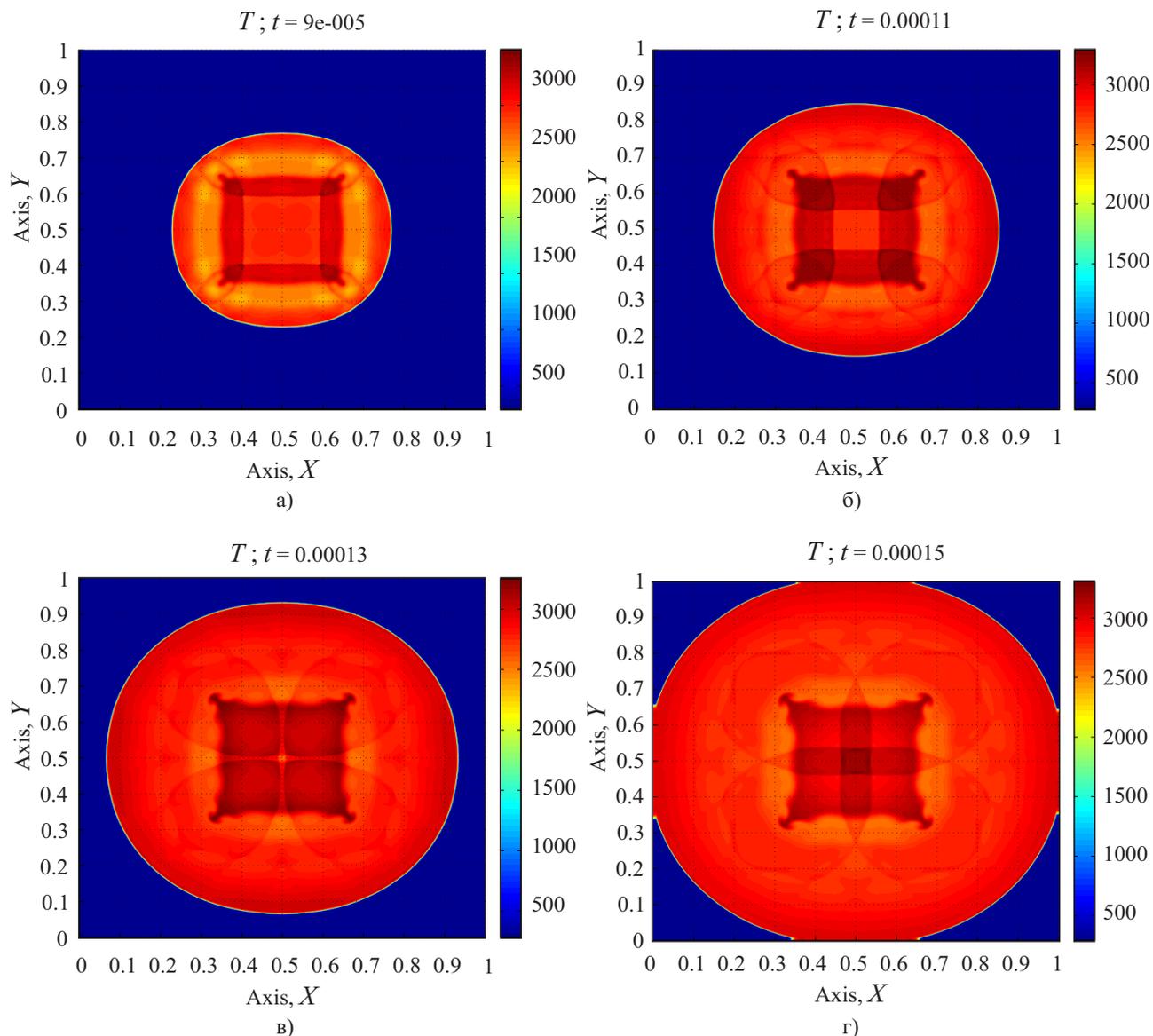


Рис. 2. Развитие процесса детонации. Поле температур

Время расчета для расчетной сетки различного размера

Размер сетки	Время вычисления, X5650, сек.	Время вычисления, M2090, сек.	Ускорение
64 × 64	8.69	2.81	3.09
128 × 128	41.19	7.61	5.41
256 × 256	317.209	35.29	8.99
512 × 512	2416.149	218.53	11.06
1024 × 1024	17981.66	1650.61	10.89

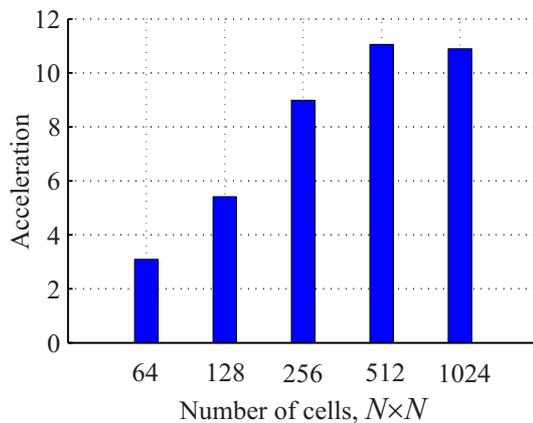


Рис. 3. Ускорение вычислений задач химической кинетики на Tesla M2090 по сравнению с Intel Xeon X5650

ускорение вычислений.

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} &= 0, \\ \frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i v_j + P \delta_{ij}) &= 0, \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [(e + P)v_i] &= 0. \end{aligned} \tag{1}$$

Уравнение состояния использовалось в форме  $e = \rho \left( \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 + \varepsilon \right)$ . В приведенной выше системе уравнений (1)  $\rho$  – плотность,  $\mathbf{v}$  – скорость,  $P$  – давление,  $\varepsilon$  – удельная внутренняя энергия и  $e$  – 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 принимают значения  $p = p_b = 1.0$  и  $\rho = \rho_b = 0.1$ . За ударной волной величины определяются с помощью соотношений Ренкина–Гюгонио. Расчетный параллелепипед покрывался прямоугольной сеткой размерами от  $64 \times 64 \times 64$  до  $512 \times 512 \times 512$ .

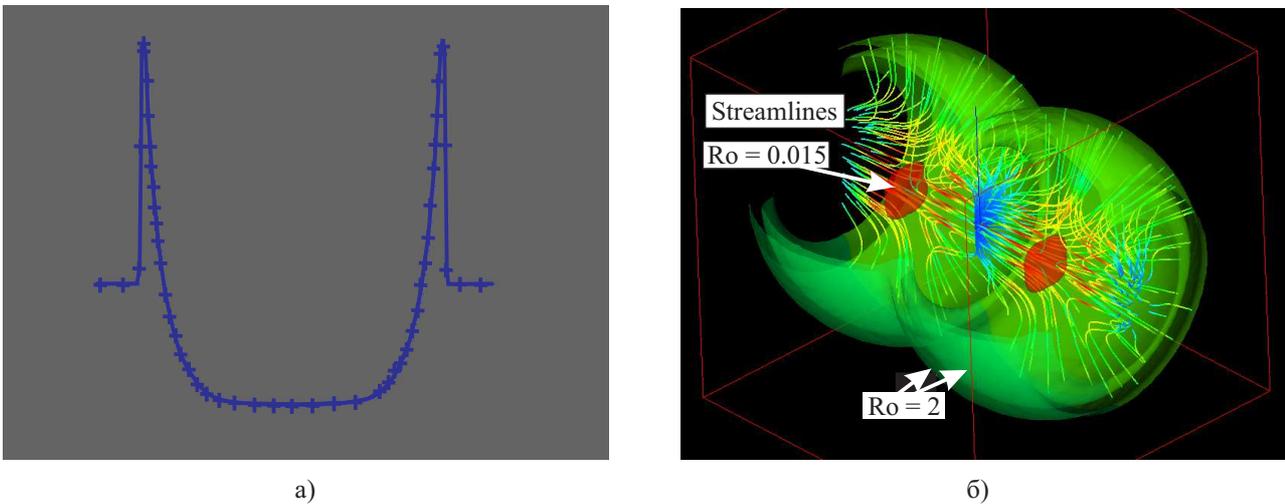


Рис. 4. Результаты тестовых расчетов: а) сравнение аналитического решения (сплошная линия) задачи Седова с численным расчетом (крестики); б) взаимодействие двух ударных волн между собой

Для решения данной задачи разработана математическая модель, алгоритм расчетов и программа для решения на графических процессорах [8]. 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 Multiple Threads, SIMT). Это позволяет создавать и управлять десятками тысяч конкурирующих потоков. Потоки можно организовывать в одно-, дву- и трехмерные потоковые блоки, каждый из которых работает на своем ядре. Все потоки выполняются независимо с использованием потоковых регистров и общей памяти.

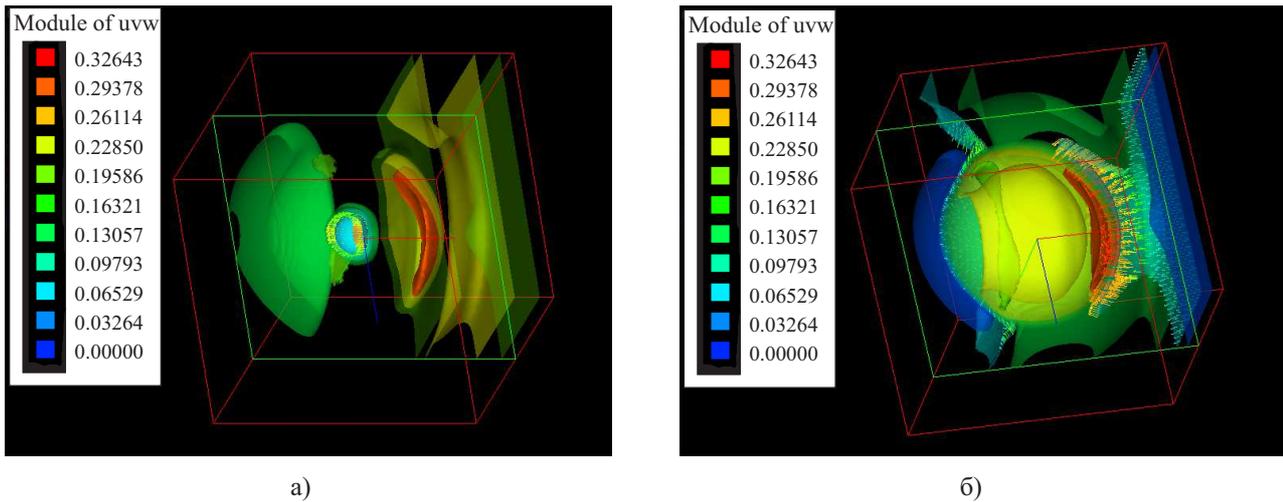


Рис. 5. Распределение плотности (а) и энергии (б) на момент времени  $t = 20.057$

На рис. 4 приведены результаты тестовых расчетов. Проводилось сравнение результатов численных расчетов с аналитическим решением автомодельной задачи Седова о точечном взрыве. Крестиками отмечено численное решение, сплошной линией — аналитическое решение. На рис. 4б — решение задачи о взаимодействии двух ударных волн от точечных взрывов в трехмерной постановке.

На рис. 5 приведено решение задачи о взаимодействии сильной плоской ударной волны со сферой, заполненной газом с термодинамическими параметрами, отличающимися от параметров газа вне сферы.

Для сравнения расчетов задач газовой динамики с учетом уравнений 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.

На рис. 6 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. Ускорение вычисляется относительно наибольшего времени счета. Из полученных результатов видно, что для малой расчетной сетки применение технологии OpenMP не дает никакого ускорения, а напротив, замедляет счет. Однако малый размер сетки не оказывает существенного негативного эффекта, свойственного графическим картам при работе с небольшими объемами данных. При увеличении числа вычислительных узлов на графическом процессоре наблюдается существенное ускорение более 25 раз по сравнению с одним ядром центрального процессора. Таким образом, предложенный параллельный алгоритм решения газодинамической части распараллеливается на графическом процессоре лучше, чем алгоритм решения химической стадии.

**5. Выводы.** Ввиду вычислительной сложности моделирование приведенных выше физических процессов 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 [2, 9–11]. Графические процессоры 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

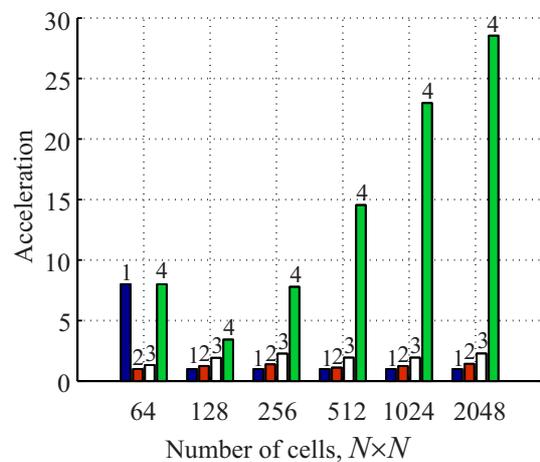


Рис. 6. Ускорение вычислений на графическом процессоре по сравнению с центральным процессором при использовании технологии OpenMP: 1) OMP 1, 2) OMP 2, 3) OMP 4, 4) CUDA

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. Это связано со сложностью системы уравнений химической кинетики. Рассмотренный метод решения данной системы расходует много ресурсов памяти, что очень критично для графических процессоров. В результате одной из модификаций алгоритма решения химической системы, направленной на сокращение используемой нитями памяти, удалось получить прирост производительности на 20% по сравнению со старой версией программы [12]. В будущем планируется ввести другие модификации, направленные на дальнейшее снижение используемой памяти ГП, оптимизацию работы самого алгоритма, адаптацию под новые разработанные архитектуры сопроцессоров, а также использование других методов решения. Планируется проведение систематических расчетов рассмотренных задач в трехмерной постановке с возможностью использования всех вычислительных ресурсов системы, включая использование нескольких графических процессоров и нескольких вычислительных узлов.

Решение гидродинамических задач практически невозможно без подробной графической визуализации полученных результатов. Это особенно справедливо для трехмерных течений. В данной работе графическая визуализация результатов компьютерного моделирования осуществлялась с помощью программы HDVIS [13], любезно предоставленной В. Д. Горячевым, за что авторы выражают ему глубокую признательность.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. NVIDIA CUDA. Programming Guide. 2012 (<http://developer.nvidia.com/cuda-downloads>).
2. Рыбакин Б.П. Параллельное программирование для графических ускорителей. М.: НИИСИ РАН, 2011.
3. Смирнов Н.Н., Никитин В.Ф., Шуреждели Ш.А. Переходные режимы распространения волн в метастабильных системах // Физика горения и взрыва. 2008. **44**, № 5. 25–37.
4. Smirnov N.N., Nikitin V.F., Phylippov Yu.G. Deflagration to detonation transition in gases in tubes with cavities // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. 2010. **83**, N 6. 1287–1316.
5. Smirnov N.N., Nikitin V.F., Shurekhdeli S.A. Investigation of self-sustaining waves in metastable systems: deflagration-to-detonation transition // Journal of Propulsion and Power. 2009. **25**, N 3. 593–608.
6. Jiang G.-S., Tadmor E. Nonoscillatory central schemes for multidimensional hyperbolic conservation laws // SIAM J. Sci. Comput. 1998. **19**. 1892–1917.
7. Maas U., Warnatz J. Ignition processes in hydrogen–oxygen mixtures // Combustion and Flame. 1988. **74**, N 1. 53–69.
8. Рыбакин Б.П., Шидер Н.И. Построение параллельных алгоритмов для решения задач гравитационной газовой динамики // Вычислительные методы и программирование. 2010. **11**. 388–394.
9. Rybakin B. Modeling of 3D problems of gas dynamics on multiprocessing computers and GPU // Computers & Fluids. 2012. DOI: 10.1016/j.compfluid.2012.01.016.
10. Рыбакин Б.П., Стамов Л.И. Использование многопроцессорных вычислительных систем и графических ускорителей для моделирования задач газодинамики // Тр. Междунар. суперкомпьютерной конференции “Научный сервис в сети Интернет: эксафлопсное будущее” (19–24 сентября 2011 г., Новороссийск). М.: Изд-во Моск. ун-та, 2011. 84–89.
11. Рыбакин Б.П., Егорова Е.В. Решение задач газовой динамики на графических ускорителях // Тр. Междунар. суперкомпьютерной конференции “Научный сервис в сети Интернет: эксафлопсное будущее” (19–24 сентября 2011 г., Новороссийск). М.: Изд-во Моск. ун-та, 2011. 326–331.
12. Рыбакин Б.П., Егорова Е.В., Стамов Л.И. Решение задач газодинамики с химической кинетикой на графических процессорах // Тр. Междунар. суперкомпьютерной конференции “Научный сервис в сети Интернет: эксафлопсное будущее” (17–22 сентября 2012 г., Новороссийск). М.: Изд-во Моск. ун-та, 2012. 483–490.
13. Балашов М.Е., Горячев В.Д., Смирнов Е.М. Визуализация результатов численного эксперимента при моделировании нестационарных течений с большим объемом данных в системе HDVIS // Тр. Междунар. суперкомпьютерной конференции “Научный сервис в сети Интернет: эксафлопсное будущее” (22–27 сентября 2008 г., Новороссийск). М.: Изд-во Моск. ун-та, 2008. 55–59.

Поступила в редакцию  
16.11.2012