УДК 517.958

КОМБИНИРОВАННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ ГАЗОВЗВЕСИ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ CUDA¹⁾

Т.Ш. ЗАРИПОВ, А.К. ГИЛЬФАНОВ

Казанский (Приволжский) федеральный университет E-mail zaript@gmail.com; artur.gilfanov@gmail.com

COMBINED METHOD OF CALCULATION OF THE GAS SUSPENSION FLOWS BASED ON CUDA TECHNOLOGY

T.S. ZARIPOV, A.K. GILFANOV

Kazan Federal University

Аннотация

Предложен комбинированный метод расчета траекторий взвешенных частиц в гидродинамических полях скоростей, использующий возможности CFD пакетов и параллельные вычисления в рамках технологии CUDA. Дано описание программного комплекса, реализующего метод. Для тестовой задачи о течении газовзвеси в упаковке цилиндров достигнуто ускорение расчетов траекторий частиц до 70 раз на рабочей станции Tesla C1060. Показано, что в упорядоченной упаковке цилиндров зависимость эффективности инерционного осаждения от числа Стокса может носить немонотонный характер.

Ключевые слова: взвешенные частицы, параллельные вычисления, технология CUDA

Summary

We propose a combined method for calculating the trajectories of suspended particles in hydrodynamic velocity fields using capabilities of CFD packages and parallel computing technology CUDA. The description of the software package that implements method is given. For the problem of flow of a gas suspension in a package of cylinders acceleration up to 70 times was achieved when calculating of particle trajectories on the working station Tesla S1060. It is shown that in an ordered packing of cylinders dependence of the efficiency of the inertial deposition on the Stokes number can be nonmonotonic.

Key words: suspended particles, parallel computing, CUDA technology.

Введение

Одной из целей исследований течений газовзвеси для многих практических задач авиационной аэромеханики является определение различных интегральных характеристик (например, коэффициента осаждения для задач фильтрации запыленных потоков или обтекания крыловых профилей). Вычисление таких характеристик в рамках лагранжевого описания дисперсной фазы основано на многочисленных расчетах траекторий взвешенных частиц. Современные CFD (Computational Fluid Dynamics) пакеты предоставляют широкие возможности расчета поля скоростей течений жидкости и газа для произвольных областей и позволяют находить траектории взвешенных частиц. Однако возникают сложности с расчетом траекторий вблизи границ и эффективным вычислением интегральных характеристик, а также с учетом дополнительных сил, действующих на частицы в гидродинамических полях.

В настоящей работе предложен комбинированный метод расчета траекторий взвешенных частиц в гидродинамических полях скоростей, использующий возможности CFD пакетов и параллельные вычисления. На основе предложенного метода разработан программный комплекс с применением технологии

¹⁾Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 12-01-00333, 12-07-00007)

параллельных вычислений на видеокартах CUDA. Комплекс реализует функции, отвечающие за считывание поля течения несущей фазы, полученного в CFD пакете, интерполяцию составляющих скорости в произвольной точке траектории, функции расчета траекторий частиц с возможностью выбора различных сил (сила тяжести, электростатическая сила и т.п.) и различных численных схем интегрирования.

Проведены тестовые расчетные исследования эффективности осаждения взвешенных частиц в упаковке цилиндров. Дано сравнение эффективности расчетов в последовательном и параллельном режимах. Показано, что комплекс позволяет значительно увеличить эффективность расчета траекторий в режиме параллельных вычислений на компьютерах с видеокартой, поддерживающей технологию CUDA.

1. Математическая модель двухфазного течения.

Допущение об отсутствии влияния дисперсной фазы на газовое течение в случае малых концентраций взвешенных частиц позволяет свести моделирование течения газовзвеси к двум отдельным задачам: гидродинамики и переноса дисперсной фазы, причем первая может быть решена независимо от второй.

Течение несущей фазы описывается системой уравнений Навье— Стокса [1], включающей в себя уравнение неразрывности

$$\nabla \cdot \bar{U} = 0, \tag{1}$$

и уравнения сохранения движения

$$\bar{U} \cdot \nabla \bar{U} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \Delta \bar{U}, \qquad (2)$$

где \bar{U} — вектор скорости газа, P — давление, ν и ρ — коэффициент динамической вязкости газа и плотность воздуха. Характер течения определяется безразмерным параметром — числом Рейнольдса Re = LU_0/ν , где L — характерный размер, U_0 — скорость невозмущенного потока. Система уравнений (1),(2), дополненная граничными условиями, представляют собой краевую задачу, решение которой получено с помощью CFD пакета.

Из множества сил, действующих на взвешенную частицу в газовых течениях, будем рассматривать силу аэродинамического сопротивления в приближении Стокса, силу тяжести и электростатическую силу. Таким образом, уравнения движения взвешенной частицы могут быть записаны в виде

$$\frac{d\bar{V}_p}{dt} = -\frac{(\bar{V}_p - \bar{U})}{\tau} + \bar{g} + \frac{\bar{F}_e}{m_p},\tag{3}$$

$$\frac{d\bar{X}_p}{dt} = \bar{V}_p,\tag{4}$$

где \bar{F}_e — электростатическая сила, действующая на заряженные частицы, \bar{X}_p — радиус-вектор координаты частицы, $\tau = m_p/3\pi\mu d_p$ — время релаксации частицы. Перепишем (3)–(4) в безразмерной форме

$$\gamma \frac{d\bar{v}_p}{dt} = (\bar{u} - \bar{v}_p) + \bar{v}_g + \bar{f}_e, \tag{5}$$

$$\frac{d\bar{x}_p}{dt} = \bar{v}_p,\tag{6}$$

где $\gamma = \tau U_0/L$ — число Стокса, $\bar{v_p} = \bar{V_p}/U_0$, $\bar{u} = \bar{U}/U_0$, $\bar{v_g} = \tau \bar{g}/U_0$ — относительная скорость седиментации, $\bar{x_p} = \bar{X_p}/L$, U_0 и L — характерные скорость и длина. Введенный безразмерный параметр γ характеризует инерционность частиц. На основе численного решения уравнений (5),(6) с начальными условиями $\bar{v}_p(0) = \bar{v}_{p0}$, $\bar{x}_p(0) = \bar{x}_{p0}$ можно рассчитать траектории движения взвешенных частиц в гидродинамическом поле, определяемым вектором \bar{u} .

2. Расчет траекторий частиц с использованием технологии CUDA.

Задача расчета траекторий взвешенных частиц в известном поле скоростей газовой среды сводится к численному интегрированию системы обыкновенных дифференциальных уравнений (5-6) методом Рунre— Кутты. Такая задача хорошо подходит для распараллеливания на графических процессорах GPU (Graphical Processor Unit) [2] в силу того, что для расчета шага траектории каждой частицы необходимо совершить один и тот же набор операций над разными данными. Поле скоростей несущей фазы из численного решения уравнений Навье— Стокса получается в виде дискретного множества значений компонент вектора скорости в центрах конечных объемов. При движении частицы по траектории, возникает необходимость определения компонент скорости газа в произвольной точке расчетной области. Для этого используются два шага: поиск текущего конечного объема и интерполяция значения скорости в произвольной точке внутри него по значениям скорости в узлах конечного объема. Для обеспечения эффективного первого шага применяется алгоритм поиска текущего конечного объема среди соседних элементов. Метод поиска ближайшего элемента, алгоритм интерполяции и методы интегрирования уравнения движения частиц легли в основу программного комплекса, позволяющего рассчитывать траектории взвешенных частиц в режиме параллельных вычислений на компьютере с видеокартой, поддерживающей технологию CUDA.

Комплекс включает в себя следующие основные функции: чтение и конвертация исходных данных во внутреннее представление библиотеки, формирование списка соседних конечных объемов для эффективного поиска текущего конечного объема при интерполяции, реализация решения уравнений движения взвешенных частиц методами Рунге— Кутты и Рунге— Кутты— Мерсона с возможностью выбирать учитываемые силы, расчет интегральных характеристик (эффективность осаждения и т.п.). В качестве исходных данных комплекс использует поле скоростей течения газовой фазы, заданное в узлах произвольной неструктурированной сетки (двумерной или трехмерной).

Для рассматриваемой нами задачи поле скоростей течения несущей фазы находится на основе решения уравнений Навье— Стокса в пакете Fluent. Комплекс реализует расчет течения газовзвеси в рамках трех различных стратегий (Таблица): расчет траекторий в последовательном режиме — CPU; расчет траекторий в параллельном режиме в рамках одного монолитного вычислительного ядра с главным циклом, выполняющимся на видеокарте, — GPU1; расчет траекторий в смешанном режиме, сводящийся к последовательным вызовам множества ядер с сохранением главного цикла на центральном процессоре, — GPU2. В рамках второго подхода (GPU1) минимизируется количество вызовов ядер из хост-программы. Необходимость использования третьего подхода (GPU2) возникает в случае, когда нужно включать в вычислительный процесс функции из сторонних библиотек.

3. Течение газовзвеси в упаковке цилиндров.

Описанный программный комплекс был использован для решения задачи о течении газовзвеси в упорядоченной упаковке цилиндров с шахматным расположением. Такая задача возникает в связи с моделированием процессов осаждения аэрозольных частиц в волокнистых фильтрах [3]. С учетом наличия симметрии течения выделим периодическую полосу рис. 1. Плотность упаковки выразится по формуле $\alpha = \pi/2h^2$ ($h = H/R_f$). Течение несущей фазы описывается уравнениями (1),(2). На границах расчетной области задаются следующие условия: на левой границе полосы известна входная скорость течения, на правой границе полосы задается нулевое избыточное давление, на верхней и нижней границах полосы принимаются условия симметрии, на твердых границах (поверхность цилиндров) задаются условия прилипания.

Описанная задача о течении газа решалась в среде программы Fluent, соответствующее сеточное разбиение расчетной области приведено на рис. 2. Расчет траекторий взвешенных частиц в найденном поле скоростей газа осуществлялся с помощью созданного программного комплекса. Частицы стартовали с левой границы со скоростью, равной скорости среды.

Для сравнения эффективности последовательной (CPU), параллельной (GPU1) и смешанной (GPU2) стратегий расчета использовался компьютер с видеокартой NVidia Tesla C1060 и процессором Intel Core i7. На рис. 3(a) - 3(6) приведены зависимости времени расчета одного варианта T и коэффициента эффективности вычислений E_{calc} от числа N моделируемых частиц. Величина E_{calc} определяется как отношение времени расчета с использованием видеокарты (GPU1 и GPU2) ко времени расчета на одном процессоре (CPU). Время последовательного расчета (CPU) растет почти линейно с ростом числа частиц. Для параллельных расчетов на видеокарте по обеим стратегиям величина T(N) мало меняется до



Рис. 1: Расчетная область и граничные условия



Рис. 2: Сеточное разбиение расчетной области

 $N \sim 10^4$. По достижении этого числа время расчета T(N) начинает расти почти линейно, как и в случае последовательного расчета. Это приводит к тому, что основной рост $E_{\rm calc}(N)$ для обеих стратегий параллельных расчетов происходит при $N < 10^4$. С дальнейшим ростом числа рассчитываемых траекторий N в связи с полной загрузкой всех ядер видеокарты величины $E_{\rm calc}(N)$ достигают своих максимальных значений и перестают меняться. Для видеокарты NVidia Tesla C1060 максимально возможное ускорение вычислений достигает 70 раз по сравнению с однопоточным выполнением на процессоре Intel Core i7 в случае использования монолитного ядра (GPU1). В случае реализации варианта GPU2 максимальная эффективность находится в пределах 40 раз, что указывает на существенное влияние переключения между хост-программой и ядром на время расчета.



Рис. 3: Зависимости T времени расчета одного варианта и E_{calc} эффективности расчета от числа частиц N.

Основной целью расчета течений газа с взвешенными частицами в упаковках является определение эффективности *E* осаждения частиц, зависящей от свойств частиц (размер, плотность, форма) и свойств газовой среды (скорость, вязкость). Рассчитывались траектории частиц, стартующих вдали от упаковки

цилиндров, при этом все частицы, достигшие поверхности цилиндра, полагаются осевшими. При большом количестве стартующих частиц величина E может быть вычислена как отношение количества N_d достигших поверхности частиц к общему числу N стартующих в полосе частиц: $E = N_d/N$. На рис. 4 представлены два варианта зависимости E от числа Стокса γ для упаковки с пористостью $\alpha = 0.2$: в одном случае частицы рассматривались как материальные точки, в другом — как сферы конечного размера, при этом частицы считались осевшими при касании их границами цилиндров, то есть принимался во внимание эффект зацепления. Видно, что для малых γ разницы между вариантами нет, и E монотонно растет с увеличением γ в силу роста инерционности частиц. Вместе с тем, при некотором γ кривая $E(\gamma)$ начинает убывать, поскольку для выбранных значения пористости и направления течения высоко инерционные частицы проходят упаковку насквозь через канал между цилиндрами. Без учета зацепления эффективность осаждения падает до значения, соответствующего отношению высоты канала к высоте входного сечения, с учетом — снова возрастает, т.к. размер начинает оказывать существенное влияние на осаждение частиц.



Рис. 4: Эффективность осаждения как функция диаметра частицы с и без учета эффекта зацепления частиц

3. Заключение.

Предложен комбинированный метод и создан программный модуль расчета траекторий взвешенных частиц в гидродинамических полях скоростей, который использует возможности CFD пакетов и реализует параллельные вычисления на компьютере с видеокартой, допускающей применение технологии CUDA. Для задачи о течении газовзвеси в упаковке цилиндров достигнуто ускорение расчетов траекторий частиц до 70 раз на рабочей станции Tesla C1060. Показано, что в упорядоченной упаковке цилиндров зависимость эффективности инерционного осаждения от числа Стокса может носить немонотонный характер.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М., Л., 1950. 677 с.
- Демидов Д.Е., Егоров А.Г., Нуриев А.Н. Решение задач вычислительной гидродинамики с применением технологии NVIDIA CUDA // Ученые записки Казанского университета. Серия физикоматематические науки. – 2010. – Т. 152, Кн. 1. – С. 142–154.
- 3. Кирш А.А., Будыка А.К., Кирш В.А. Фильтрация аэрозолей волокнистыми материалами ФП // Российский Химический Журнал (ЖРХО им. Д.И. Менделеева). — 2008. — Т. 52, Кн. 5. — С. 97—102.

REFERENCES

- 1. Loicanskii L.G. Fluid mechanics [Mekhanika zhidkosti i gaza]. Moscow: Nauka. 1950. 677 p. (in Russian)
- 2. Demidov D. E., Egorov A. G., Nuriev A. N. Application of NVIDIA CUDA technology for numerical solution of hydrodinamic problems // Physics and mathematics, Kazan. Gos. Univ. Uchen. Zap. Ser. Fiz.-Mat. Nauki, Kazan University, Kazan. 2010. V. 152, № 1. P. 142–154. (in Russian)
- 3. Kirsh A. A., Budyka A. K., Kirsh V. A. Filtration of aerosols with fiber materials FP // Rossiiskii Khimicheskii Zhurnal. 2009. V. 52, № 5. P. 97–101. (in Russian)