

基于建表技术的化学加速并行算法 在气相爆轰数值模拟中的应用¹⁾

董刚^{*,2)}, 吴锦涛^{*}, 刘云峰⁺

* (南京理工大学瞬态物理重点实验室, 南京 210094) + (中国科学院力学研究所 LHD, 北京 100190)

摘要: 考虑基元化学反应的可压缩流动的数值模拟花费巨大, 在保证计算精度不变的前提下, 提高计算效率具有重要的实际意义。在自适应建表 (*in situ adaptive tabulation, ISAT*) 的基础上, 针对 MPI 并行架构, 提出了基于 ISAT 技术的并行策略, 并以此形成了化学加速并行算法。提出的并行策略包含以 PLP 和 TP 为代表的底层 (primary) 策略和以 DEP 和 DAP 为代表的均衡 (balanced) 策略, 两种策略的结合形成了一系列不同的化学加速并行算法。详细考察了这些算法在二维气相爆轰数值模拟中的计算性能, 考察的可变因素包括算法策略、反应机理、数值格式精度和建表尺寸等, 而计算性能主要包括计算精度和计算效率。计算结果表明, 本文发展的基于建表的并行加速算法在不损失计算精度的前提下, 针对本文大多数计算条件下均能保持 3-5 左右的化学加速比, 因而具有良好的计算效率。研究结果进一步表明, 计算效率与并行计算的不同分区的建表操作过程密切相关, 表操作之间的均衡性和同步性决定了算法的计算效率。

关键词: 建表, 化学加速, 气相爆轰, 计算精度和效率, 数值模拟

引言

在化学反应流的数值模拟中, 含有大量组分和基元反应的详细化学反应机理通常用于描述流动中的燃烧过程。由于其中各种化学组分生存时间尺度相差很大 (最高可达 10-11 个数量级)^[1], 因此化学反应的计算具有强烈的刚性, 这会导致极大的计算花费。为提高化学反应流的计算效率, 传统方法主要是对化学反应机理进行简化 (例如, 文献[2]-[6])。然而, 对机理的简化通常强烈依赖于具体的物理问题, 从而导致获得的简化机理不具有通用性; 此外, 简化机理通常也不能对痕量 (浓度很小) 物质进行预测, 而有些痕量物质在燃烧过程中往往十分重要, 如燃烧过程中对污染物 NO_x 的预测。

基于建表技术的存储/取回算法是不同于简化机理的一类提高化学计算效率的方法。这类方法的原理是: 考虑到流场中化学反应的热力学状态具有可重复性, 因此在计算化学反应的过程中, 可以把化学反应导致的状态变化记录在数据表中, 在流场其他位置或时刻的状态变化可以通过查表来获得 (取回), 这样用快速的存储/取回操作来代表耗时的计算过程 (通常采用积分的方法), 就可以极大地提高计算效率。文献中报道的这类方法主要包括结构化查表方法^[7], 人工神经网络方法 (artificial neural networks, ANN)^[8, 9], 当地自适应建表 (*in situ adaptive tabulation, ISAT*)^[10], HDMM 方法^[11]和 PRISM 方法^[12]等。在这些方法中, ISAT 方法尤其得到了广泛的应用, 例如, 对低 Ma 数下的稳态燃烧问题, ISAT 方法的化学加速比可以达到几百甚至上千^[13, 14]。然而, 针对非稳态燃烧问题, 由于流场热力学状态的重复性下降, 因此 ISAT 的计算效率会有所下降。尤其是, 当热力学状态的变化很快时, 数据表中的数据取回率会明显下降, 新的数据会不断插入数据表中, 从而使数据表尺寸迅速增长直至突破计算机内存而导致计算中断。为改善这一问题, 董刚等^[15, 16]发展了一种可以删除数据表的简化 ISAT 算法, 即, 当数据表尺寸达到规定的阈值后, 可以对数据表中的数据进行部分或全部的删除, 以控制表的大小。这种所谓的存储/删除方法应用于气相爆轰 (非稳态过程) 的数值模拟中, 在不损失计算精度的前提下, 化学加速比可以达到 3.87^[16]。

上述基于建表技术的算法都是针对串行计算进行的。在并行计算中, 建表策略则变得复杂起来, 因为不同的计算分区拥有各自的数据表, 如何让不同的数据表操作之间能高效协同地工作, 是进一步提高并行建表算法效率的关键。Lu 等^[17]针对 ISAT 方法提出了一系列并行算法, 并在稳态搅拌反应器问题中进行了应用。其研究表明, 不同的算法 (策略) 其计算效率明显不同。然而, 这些算法主要针对稳态燃烧问题, 对流场热力学状态急剧变化的非稳态问题, 发展合适的并行化学加速算法仍是非常必要的。

¹⁾ 国家自然科学基金 (11872213) 资助项目

²⁾ 通讯作者: 董刚 (1970-), 研究员, 主要研究方向: 可压缩反应流的数值模拟. E-mail: dgvehicle@yahoo.com

本文针对非稳态可压缩反应流的典型问题——气相爆轰波传播,发展了一系列基于 MPI 并行架构的化学加速算法,系统考察了基于算法因素(建表策略、格式精度、删表策略)和化学因素(反应机理)变化的气相爆轰过程中,上述算法的计算性能(精算精度和计算效率),分析了影响计算性能的内在原因。

1 并行化学加速算法

1.1 存储/删除方法

存储/删除方法是本文并行化学加速算法的核心,它是基于 ISAT 方法^[10]的数据表操作算法,原理如下:对含有 K 种组分的化学热力学体系,其热力学状态构成的状态空间可表达如下:

$$\Phi=(Y_1, \dots, Y_K, T, \rho)=(\phi_1, \dots, \phi_K, \phi_{K+1}, \phi_{K+2}) \quad (1)$$

在燃烧过程中,流场内的每个网格的组分浓度在规定时间步长 Δt 发生的化学变化为:

$$\phi_k^1 = \phi_k^0 + \int_{\Delta t} s_k dt \quad (k=1, \dots, K) \quad (2)$$

式中 s_k 为组分 k 的化学反应源项;同时,可以根据能量守恒律采用积分方法求解温度 ϕ_{K+1} 。上述状态函数的积分求解过程被称为直接积分(direct integration, DI)。由于式(2)中 s_k 具有很强的刚性和非线性,DI 过程会耗费大量计算时间。相反,ISAT 技术是通过建立数据表并对表中数据进行问询/取回,以此代替式(2)的 DI 积分过程,从而获得化学反应的近似解。

考虑流场中一个待问询的化学热力学状态矢量 Φ^q ,如果数据表中存在某一状态 $\Phi^{(j)}$ 的节点与其足够接近,则 Φ^q 所对应的化学变化 $\mathbf{R}(\Phi^q)$ 可由存储在数据表中的 $\Phi^{(j)}$ 和对应的 $\mathbf{R}(\Phi^{(j)})$ 通过 Taylor 级数展开获得。通过合理控制误差范围,可以采用如下的零阶近似方法获得热力学状态的变化:

$$\mathbf{R}(\Phi^q) = \mathbf{R}(\Phi^{(j)}) + o(|\Delta\Phi|) \quad (3)$$

因此,定义一个准确的误差范围相当重要。本文定义的数据表节点 $\Phi^{(j)}$ 的误差范围如下:

$$\mathbf{e}^\pm(\Phi^{(j)}) = \{e_1^\pm(\phi^{(j)}), \dots, e_k^\pm(\phi^{(j)}), \dots, e_{K+2}^\pm(\phi^{(j)})\} \quad (4)$$

式中, e_k^\pm 代表了状态参量中第 k 个分量的误差,其中上标“+”和“-”分别代表 $\phi^{(j)}$ 的误差上限和误差下限。由于式(4)表达的误差上、下限之间的误差范围共有 $K+2$ 维,因此 \mathbf{e}^\pm 的定义就构成了一个超矩形误差域(hyper-rectangle of accuracy),若状态矢量 Φ^q 落在 $\Phi^{(j)}$ 所对应的超椭圆误差域内,则 $\mathbf{R}(\Phi^q)$ 通过式(4)获得 $\mathbf{R}(\Phi^{(j)})$ 的线性近似值。由于数据表的问询/取回所耗费的时间远小于直接积分求解的时间,因此可以起到加速的作用。

另外,由于计算包含间断的瞬态可压缩反应流问题,流场内的热力学状态随时空变化很大,表中的大量数据无法被取回。一旦表中数据无法取回,则流场中的化学变化将通过 DI 的方法进行计算(式 3),同时将计算得到的结果作为新的节点存入数据表中,这样就会造成数据表内节点数量急剧上升,甚至突破计算机内存使用上限导致计算中断。因此,董刚等^[16]在上述零阶近似的 ISAT 方法中引入了数据表的节点删除机制,有效地控制了表的快速生长过程。

1.2 并行建表策略

对于并行计算问题,流场常常划分为多个计算子区,如果建立数据表与子区的一一映射关系,则需要多个数据表。若每个数据表所对应的流场状态不同,那么每个数据表对流场状态的操作也不同,因而直接影响了表操作之间的负载平衡。因此,提出合适的并行建表策略是并行化学反应计算加速的关键。

一种简单直观的方法是建立计算域的每个并行子区的数据表,化学过程的处理仅在自己的表中执行,不同子区的数据表之间不存在数据交流,这种方法被称为纯局部处理(PLP)法^[17]。显然,

不同分区流场变化的差异将导致数据表操作之间的差异，从而影响并行计算的整体效率。

由于计算子区与数据表并不存在绝对的物理映射关系，因此在计算机内存中，也可以指定某个数据表处理某个流场区域，这就为提高表操作的负载平衡性提供了可能。能够实现的另一种方法称之为转置处理（TP）法^[18]。在 TP 方法中，数据表以转置的方式和不同的子区内相同位置的数据块相对应，数据表数量与分区数量相一致。

针对本文气相正爆轰过程的 PLP 和 TP 两种建表策略可如图 1 所示。图 1(a)的 PLP 方法中，整个流场沿着爆轰波（DW）传播的方向被均匀地划分成 n 个相等大小的并行分区（ S_1-S_n ），同时，数据表（ T_1-T_n ）依次建立在与之对应编号的分区内。在整个数值模拟的过程中，各个数据表之间没有相互的数据传递，每个数据表只处理本地分区内的化学反应计算；图 1(b)的 TP 方法中，各并行分区（ S_1-S_n ）依旧沿着爆轰波传播方向划分，然而，数据表（ T_1-T_n ）按序建立在其对应分区转置后的位置上。本文将 PLP 策略和 TP 策略合称为底层建表策略（primary strategy）。

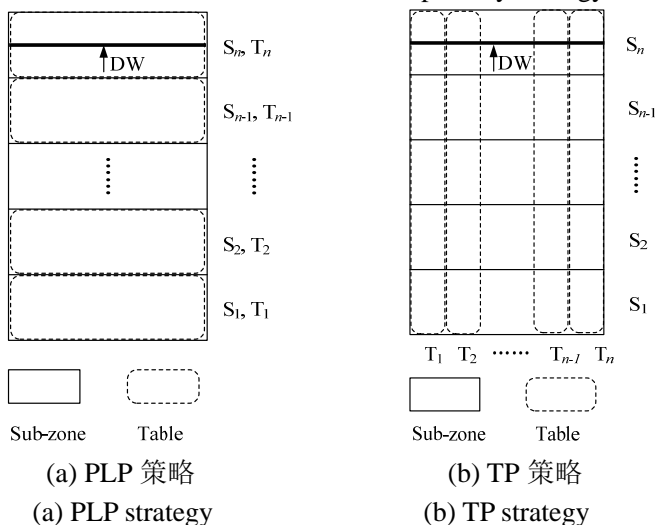


图 1 并行建表策略示意图

Fig. 1 Parallel tabulation strategies

在实际计算过程中，即使选取了适用的底层建表策略，仍不总能保证每个数据表在操作效率上的一致。另外，考虑到瞬态问题中化学热力学状态分布的随机性和不稳定性，在某个具体的时间步内，各数据表所执行的表操作并不完全一致。当随机性和不稳定性发生在流场内化学反应比较剧烈的区域时，这种不一致性会愈发明显。因此，本文提出了针对瞬态可压缩反应流数值计算的另一类并行策略，即，负载均衡策略（balanced strategy），以进一步改善数据表操作上的负载均衡性。这类负载均衡策略包括数据分摊处理（Data Apportion Processing, DAP）和数据交换处理（Data Exchange Processing, DEP）两种方法，二者均通过 MPI 通讯协议进行数据传递，不同的是，DAP 的执行基于数据分摊（apportion）操作，而 DEP 的执行基于数据交换（exchange）操作。两种策略的原理可参见图 2。

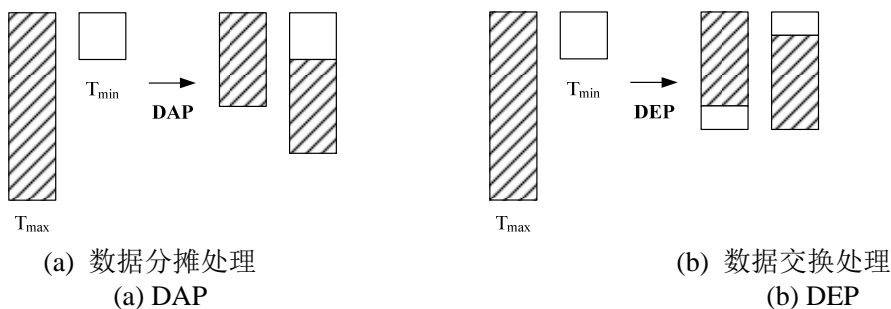


图 2 负载平衡建表策略示意图

Fig. 2 Load balanced tabulation strategies

底层建表策略 (primary strategy) 可以单独形成并行建表化学加速算法, 如纯粹 PLP 算法; 也可以与负载均衡策略 (balanced strategy) 结合形成其他算法, 如 TP/DEP 算法, 因而可形成一系列算法。

1.3 并行删表策略

数值模拟中如果流场内的热力学状态随时空变化很大, 则数据表能够被取回的数据的次数将减少, 从而导致需要插入表中的节点数量急剧上升, 甚至超出计算机的内存上限导致计算中断。因此, 对数据表中的数据节点做适当的删除十分必要。对单表单一计算域 (串行计算) 问题而言, 可设定数据表的节点最大容量 M , 当数据表节点数量超过 M 时, 则对表中某些节点予以删除, 从而达到对数据表尺寸进行控制的目的。

对并行建表方法, 删表策略则比较复杂。除了设定每个数据表的节点最大数量 (容量) M_{sin} 外, 还可以设定所有数据表总的最大数量 M_{tot} 。这两个容量的不同可以显著影响表操作过程, 进而对化学反应计算效率产生影响。为此, 本文设定了不同的 M_{tot} 和 M_{sin} 来考察删表策略对计算效率的影响。在删表策略中, 每个数据表均采用了节点删除的操作方式, 即, 对从未被取回过的节点予以删除, 而表中其它节点则予以保留。

2 算法在气相爆轰模拟中的应用

2.1 计算构型

为检验本文提出的算法的计算性能, 针对二维气相正爆轰过程进行了数值模拟。计算采用带基元化学反应的多组分二维 Euler 方程求解, 其中的对流项采用高精度 WENO 格式^[19]求解, 化学反应源项则采用上一节描述的并行化学加速算法求解。为考察算法的计算性能, 反应源项还采用隐式的基于 Gear 算法的直接积分 (DI) 进行了求解^[20]。为研究反应机理对算法性能的影响, 采用了 H_2/O_2 ^[21] 和 $\text{C}_2\text{H}_4/\text{O}_2$ ^[22] 两种机理分别模拟 H_2+2O_2 和 $\text{C}_2\text{H}_4+3\text{O}_2$ 的正爆轰波传播过程。本文使用的程序在可压缩流的数值模拟中得到了广泛应用^[23-25], 其可靠性得到了有效验证。

图 3 为本文的正爆轰计算构型。整个计算区域是一个二维竖直矩形, x 方向上的长度 (L_x) 为 3mm, y 方向上的长度 (L_y) 为 9mm。计算初始时刻, 在 $y=0\sim 3$ mm 的区域范围内, 设置一道 ZND 形式的爆轰波, 波阵面上方的区域 ($y=3\sim 9$ mm) 内充满了初始压力 $p_0=1\text{atm}$ 和初始温度 $T_0=298.15\text{K}$ 的等当量比 $2\text{H}_2+\text{O}_2$ 预混气。为尽快刺激波阵面失稳以引发胞格爆轰, 在波阵面上方的中心位置处设定一个小尺寸的扰动区 (disturbance), 压力为初始压力 (p_0) 的 38 倍。计算区域的上下边界采用零梯度边界条件, 左右边界采用绝热滑移刚性壁面条件。采用均匀正交网格覆盖整个计算区域, 网格尺寸为 $\Delta x=\Delta y=0.01$ mm。图 4 为采用 DI 方法计算得到的 $2\text{H}_2+\text{O}_2$ 爆轰波在计算结束时刻 (时间步 28,000) 流场内的压力和 H_2O_2 浓度分布图, 图中清晰地显示出爆轰波阵面处的横波 (TW)、入射激波 (SW)、马赫干 (MS) 和三波点 (triple point) 结构, 表明正爆轰波实际上是以非稳态方式传播的。

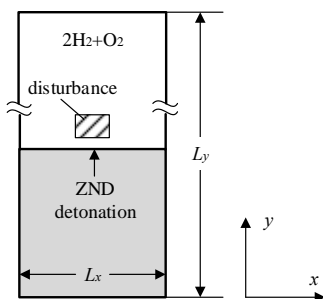


图 3 计算构型

Fig. 3 Computational configuration

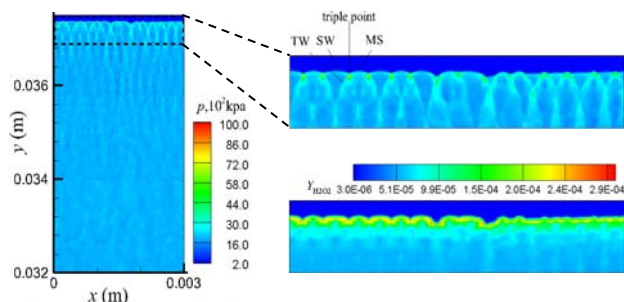


图 4 $2\text{H}_2+\text{O}_2$ 爆轰波直接积分 (DI) 计算结果

Fig. 4 Computational results of $2\text{H}_2+\text{O}_2$ detonation by DI

2.2 建表策略的影响

表 1 给出了不同建表策略组合形成的几种算法的计算效率的比较, 其中 σ_N 为删表频率偏差, 表征了不同分区数据表操作之间的均衡性, 定义如下

$$\sigma_N = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (N_i - \bar{N})^2 \right)^{1/2} \quad (5)$$

式中, N_i 代表了数据表 i 在整个计算过程中执行节点删除操作的次数, \bar{N} 是它们的平均数, n 为分区/数据表的数量, 因此, σ_N 实际上代表了不同数据表在计算过程中执行节点删除操作次数上的差异。此外, 表 1 中 $\langle R_r \rangle$ 为数据表中数据的平均取回率, 表征的数据表的取回效率; 而 R_s 则代表算法的化学加速比。由该表可知, 在所有算法中, TP/DEP 算法加速比最高, 为 3.57; 而 PLP 算法的加速比最低, 为 2.50。由 σ_N 的变化也可看出, 较高的 RS 对应了较小的 σ_N , 说明表操作间的均衡性好是有助于提高计算效率的。表 1 的结果还表明, 本文所有算法的数据表平均取回率都在 90%以上, 但取回率的变化与加速比之间没有必然的联系。

表 1 并行建表化学加速算法的计算效率

Table 1 Computational efficiency of the parallel chemistry acceleration algorithms

	PLP	PLP/DAP	PLP/DEP	TP	TP/DAP	TP/DEP
σ_N	4.80	1.01	2.09	1.63	0.65	1.50
$\langle R_r \rangle / \%$ *	92.09	90.30	92.81	91.75	90.87	92.02
R_s *	2.50	3.16	3.00	3.27	3.34	3.57

*最后时刻 (时间步 28,000) 的结果

考虑到气相爆轰波流场为瞬时场, 为定量检验并行建表化学加速算法的精度, 首先给出流场平均积分量的定义, 作为检验计算精度的指标, 表达如下

$$\bar{U}(y, t) = \frac{1}{L_x} \int_0^{L_x} U(x, y, t) dx \quad (6)$$

式中, $U(x, y, t)$ 代表 t 时刻流场内某一位置坐标为 (x, y) 处的瞬时物理量, 而 L_x 为计算区域沿着 x 方向的长度。显然, 积分量 $\bar{U}(y, t)$ 代表了数值计算结果沿着爆轰波传播方向 (y 方向) 的平均值。因此, 通过比较并行建表化学加速算法与 DI 计算的平均积分量 $\bar{U}(y, t)$, 可以判断计算过程中任意瞬时刻内流场的计算精度。

考虑到基于 TP 算法的计算效率高于基于 PLP 算法的计算效率, 图 5 给出了计算结束时刻 (时间步为 28,000) 基于 TP 的算法 (见表 1) 计算的流场内压力 p 、温度 T 和两种组分 (OH 和 H_2O_2) 浓度的平均积分量的分布曲线。为便于对比, 也给出相同时刻下直接积分 (DI) 的计算结果。所有基于 TP 的算法其计算结果与 DI 方法吻合的很好, 表明本文基于 TP 建表策略的算法的计算精度没有损失。

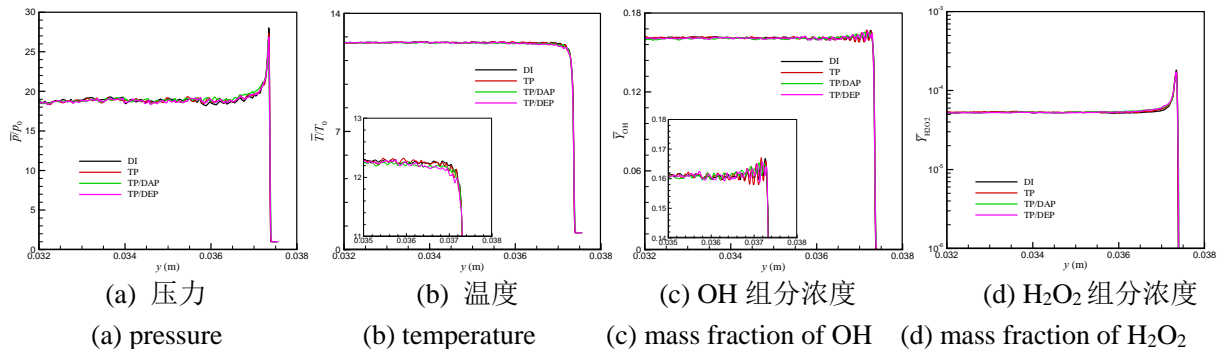


图 5 DI 方法和算法计算的平均结果的比较 (时间步长为 28,000)

Fig. 5 Comparisons of averaged results by DI method and by algorithms (the time step is 28,000)

2.3 计算格式精度和反应机理的影响

数值计算格式精度和化学反应机理会改变计算过程中热力学状态,因而会影响算法的计算性能。为考察两者的影响,对数值格式采用了9阶WENO和5阶WENO两种精度的格式进行计算,对反应机理则采用了 H_2/O_2 和 $\text{C}_2\text{H}_4/\text{O}_2$ 两种反应机理。考虑到表1的计算结果,并行算法选择的是TP/DEP,具体计算参数见表2。

表2 不同条件下二维气相爆轰波传播过程的数值模拟算例及其对应参数

Cases	Reaction mechanism	Numerical resolution	Time steps	D_{DI} (m/s)	D_{CJ} (m/s)
1	$2\text{H}_2+\text{O}_2$	9th-WENO	18,000~28,000	2819.96	2843.16
2	$2\text{H}_2+\text{O}_2$	5th-WENO	20,000~30,000	2848.31	2843.16
3	$\text{C}_2\text{H}_4+3\text{O}_2$	9th-WENO	12,100~22,100	2385.00	2368.71
4	$\text{C}_2\text{H}_4+3\text{O}_2$	5th-WENO	12,100~22,100	2382.65	2368.71

表2中 D_{DI} 表示直接积分计算的爆轰波平均传播速度; D_{CJ} 表示相同物理条件下的C-J理论爆速。可以看出,不同算例下两者的最大相对误差为0.8%,说明本文计算的可靠性。图6给出了不同算例计算的 H_2O_2 平均质量分数沿流向的变化规律,这一结果表明,即使是对于痕量物质 H_2O_2 (质量分数分布的范围在 $10^{-11}\sim 10^{-4}$),TP/DEP算法和DI计算的结果在不同的反应机理和数值格式上均能相互吻合得很好,从而进一步证明本文所采用的并行建表化学加速算法是适用于不同反应机理和数值格式的。

图7为不同算例下,计算的化学加速比随时间步长的变化关系。可以看出,化学反应机理几乎主导了化学反应加速比曲线发展过程。在 $2\text{H}_2+\text{O}_2$ 爆轰波的数值模拟(TP/DEP-1和TP/DEP-2)中, R_s 经历了前期的快速增长随后衰减直至平稳的发展过程;而在 $\text{C}_2\text{H}_4+3\text{O}_2$ 爆轰波的数值模拟(TP/DEP-3和TP/DEP-4)中, R_s 则呈现出持续缓慢增长直至平稳的发展趋势。在第5,500个时间步以前,TP/DEP算法在 $2\text{H}_2+\text{O}_2$ 系统中的加速比要明显高于在 $\text{C}_2\text{H}_4+3\text{O}_2$ 系统中的加速比。然而,在时间步5,500之后,两种燃料类型下的加速比曲线几乎趋向一致。在计算结束时刻(第10,000个时间步),TP/DEP-1~TP/DEP-4四个算例的加速比取值依次是3.57、3.61、4.67和4.06,其中,乙烯反应机理(TP/DEP-3和TP/DEP-4)中 R_s 的取值更高。另外,根据图7的结果还可以发现,数值格式对计算效率的影响并不明显。

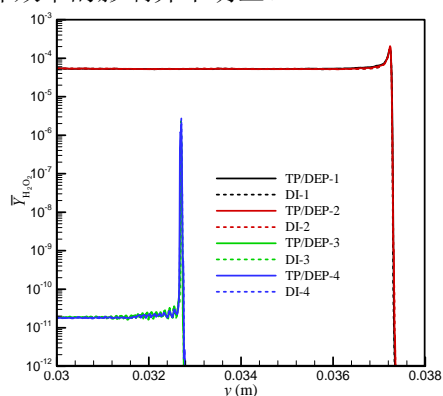


图6 不同算例计算的 H_2O_2 平均浓度
Fig. 6 Averaged mass fraction of H_2O_2 for different cases

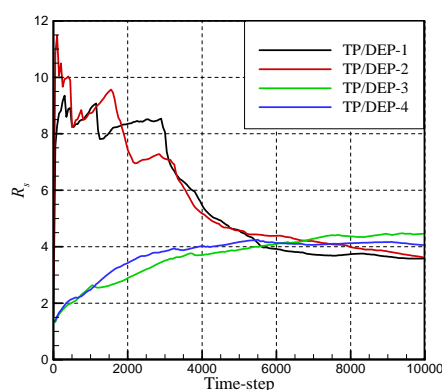


图7 不同算例计算的化学加速比曲线
Fig.7 Curves of chemical speed-up ratios for different cases

2.4 删表策略的影响

在算法应用中发现,由于每个数据表对应的流场区域内热力学状态不同,每个表操作导致的数

据表尺寸的增长速度也有所不同,这影响了数据表操作之间的同步性,使得计算效率有所下降。如果能够通过控制数据表的尺寸,同时删除数据表,则有可能提高表操作之间的同步性。为此,本文还设计了不同阈值的总表尺寸 M_{tot} 和单表尺寸 M_{sin} 来考察这两类删表策略对算法计算性能的影响,相关算例即表尺寸参数参见表 3。在计算中,仍然采用 TP/DEP 的建表算法,反应机理为 H_2/O_2 机理,使用的数值格式精度为 9 阶 WENO。

表 3 不同删表策略及其加速比

Table 3 Deletion strategies of tables and their speedup ratios

Cases	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$M_{sin}/\times 10^6$	3.0	6.0	9.0	12.0	15.0	9.0	9.0	9.0	9.0	9.0	9.0	9.0
$M_{tot}/\times 10^6$	45.0	45.0	45.0	45.0	45.0	27.0	45.0	63.0	72.0	81.0	90.0	99.0
R_s^*	3.57	3.65	4.29	3.00	3.16	3.24	4.29	5.52	4.43	3.93	4.09	4.76

*最后时刻(时间步 28,000)的结果

图 8 首先给出了本节几个典型算例(4、8 和 12,见表 3)计算精度的结果。图 8 (a) 为计算的爆轰波平均爆速的相对误差随时间的变化。结果显示,数值模拟中不同算例在整个计算过程中的相对误差均小于 0.5%,充分证明了删表策略下的并行建表化学加速算法的精确性。图 8 (b) 进一步给出了计算结束时刻, $2H_2+O_2$ 爆轰过程中流场的组分 H_2O_2 的平均浓度沿流向的变化曲线,并将其与直接积分(DI)方法计算的结果作了对比,该结果同样表明,这几个算例的计算结果均能与 DI 的结果保持高度一致,进一步验证了算法的计算精度。实际上,其它数据表尺寸(M_{sin} 和 M_{tot})下的其它算例在计算精度上的表现也是如此,这证明删表策略的使用对算法的计算精度没有影响。

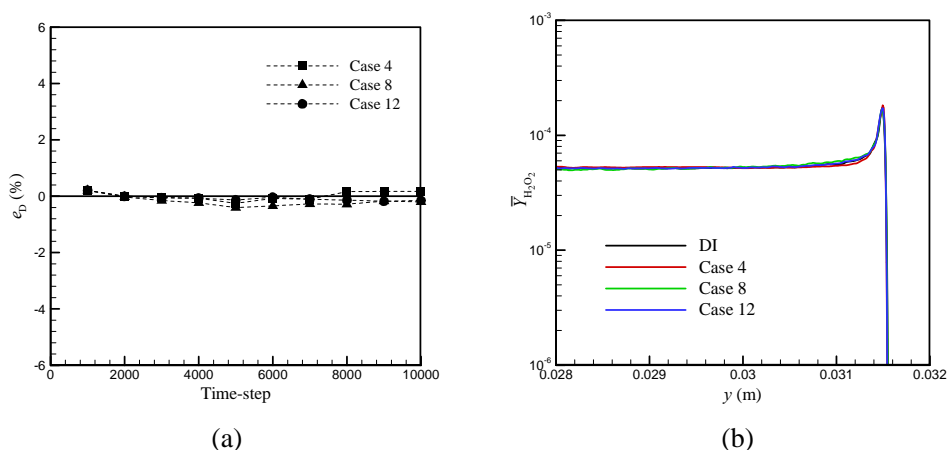


图 8 典型算例的计算精度 (a) 爆轰波传播速度相对误差, (b) H_2O_2 平均浓度

Fig. 8 Computational accuracies of different cases. (a) Relative errors of propagating speed of detonation wave, (b) averaged mass fraction of H_2O_2 .

表 3 还给出了本节所有算例的在计算终了时刻的化学加速比的值,可以看出,在各种删表策略下算法的化学加速比仍在 3-5.5 之间变化。为探究影响算法效率的主要因素,本文除采用 σ_N 外作为数据表操作之间的负载均衡性指标外(见式 5),还定义了另一个参数 p ,作为数据表操作之间的同步性指标

$$p = \frac{t_w}{\langle t_c \rangle} \quad (7)$$

式中, t_w 代表了采用 TP/DEP 算法计算化学反应的实际墙上时间累计值, $\langle t_c \rangle$ 代表了算法内不同数据表执行表操作累计 CPU 时间的平均值。因此,参数 p 代表了计算源项的实际耗时(包括表操作时间和相互等待的时间)与纯粹表操作耗时之间的比值。显然, p 的取值越低,数据表操作之间的同步性就越好。

图 9 给出了表 3 中所有算例的效率指标之间的相关性曲线及相关系数。其中,负载均衡性指标

σ_N (式 5) 和同步性指标 p (式 7) 均为累计值, 加速比 R_s 为计算结束时刻的取值。图 9 (a) 的结果显示, 在 $2\text{H}_2+\text{O}_2$ 爆轰波数值模拟中, 表操作负载均衡性 (σ_N) 与算法计算效率 (R_s) 之间的相关系数为 $R^2=0.7835$, 更小的 σ_N 取值对应于更高的加速比 R_s 。然而, 图 9 (b) 中的结果显示, 表操作同步性 (p) 对计算效率 (R_s) 的影响并不显著, 然而, 如果将总表尺寸较大的算例 ($M_{\text{tot}} \geq 72.0 \times 10^6$, 见图 9b 中虚椭圆内的算例) 移除时, p 与 R_s 之间的相关系数可达到 $R^2=0.8081$, 且 p 越小越有利于提升加速比 R_s 。考虑到被移除的这部分算例中, 总表尺寸的设置值都比较大, 它们的节点删除操作在整个计算过程中发生的次数很小, 对表操作之间的同步性几乎不造成影响, 可以忽略这部分算例中表操作同步性的作用。

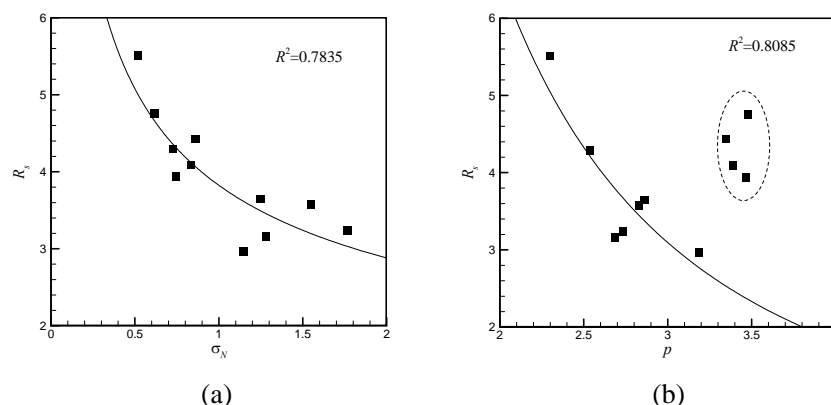


图 9 不同删表策略的算例计算的(a) σ_N 与 R_s 和(b) p 与 R_s 之间的相关性曲线

Fig. 9 Correlations between (a) σ_N and R_s and (b) p and R_s for different cases with deletion strategy.

3 结 论

本文针对可压缩反应流计算花费巨大的特点, 提出了一系列基于建表技术的并行化学反应加速算法, 并在二维气相正爆轰波传播过程的数值模拟中进行了应用。系统地研究了基于建表策略的各类算法、数值计算的格式精度、化学反应机理以及删表策略等因素对算法计算精度和计算效率的影响规律。从计算结果的对比和分析来看, 在所有因素的变化过程中本文提出的算法在计算精度上均没有明显损失, 而且在大多数情况下化学加速比保持在 3-5 之间, 这样的结果说明, 本文提出的系列算法在实际可压缩反应流的数值模拟应用中是具有重要价值的。

进一步, 本文还考察了影响算法计算效率的主要因素, 研究发现并行数值模拟中, 不同分区的数据表之间表数据的负载均衡性和同步性对计算效率均有显著影响。更好的负载均衡性和明显的同步性是提高计算加速比的关键。

参考文献

- 1 Warnatz J, Mass U, Dibble RW. Combustion: physical and chemical fundamentals, modelling and simulation, experiments, pollutant formation. 4th Edition. Berlin: Springer, 2006
- 2 Maas U, Pope SB. Simplifying chemical kinetics: intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. Combustion and Flame, 1992, 88(3-4): 239-64
- 3 Mauss F, Peters N, Rogg B, et al. Reduced kinetic mechanisms for premixed hydrogen flames. In: Peters N, Rogg B, editors. Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1993. p. 29-43
- 4 Massias A, Diamantis D, Mastorakos E, et al. An algorithm for the construction of global reduced mechanisms with CSP data. Combustion and Flame, 1999, 117(4): 685-708
- 5 Lu T, Law CK. A directed relation graph method for mechanism reduction. Proceedings of the combustion institute, 2005, 30: 1333-1341
- 6 Jones WP, Rigopoulos S. Reduced chemistry for hydrogen and methanol premixed flames via RCCE. Combustion Theory and Modelling, 2007, 11(5): 755-80

- 7 Chen JY, Kollmann W, Dibble RW. PDF modeling of turbulent non-premixed methane jet flames. *Combustion Science and Technology*, 1989, 64(4-6):315-346
- 8 Christo FC, Masri AR, Nebot EM. Artificial neural network implementation of chemistry with PDF simulation of H₂/CO₂ flames. *Combustion and Flame*, 1996, 106(4): 406-427
- 9 Blasco JA, Fueyo N, Dopazo C, et al. Modelling the temporal evolution of a reduced combustion chemical system with an artificial neural network. *Combustion and Flame*, 1998, 113(1-2): 38-52
- 10 Pope SB. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1997, 1(1): 41-63
- 11 Rabitz H, Ömer Alis F. General foundations of high-dimensional model representations. *J Math Chem*, 1999, 25(2): 197-233
- 12 Tonse SR, Moriarty NW, Brown NJ, et al. PRISM: piecewise reusable implementation of solution mapping. An economical strategy for chemical kinetics. *Isr J Chem*, 1998, 39(1): 97-106
- 13 Contino F, Jeanmart H, Lucchini T, et al. Coupling of in situ adaptive tabulation and dynamic adaptive chemistry: an effective method for solving combustion in engine simulations. *Proceedings of the combustion institute*, 2011, 33: 3057-3064
- 14 Yang B, Pope SB. Treating chemistry in combustion with detailed mechanism- s—in situ adaptive tabulation in principal directions—premixed combustion. *Combustion and Flame*, 1998, 112(1-2): 85-112
- 15 Dong G, Fan BC, Chen YL. Acceleration of chemistry computations in two-dimensional detonation induced by shock focusing using reduced ISAT. *Combustion Theory and Modelling*, 2007, 11(5): 823-837
- 16 Dong G, Fan BC. Chemistry acceleration modeling of detonation based on the dynamical storage/deletion algorithm. *Combustion Science and Technology*, 2009, 181(9): 1207-1216
- 17 Lu L, Lantz SR, Ren Z, et al. Computationally efficient implementation of combustion chemistry in parallel PDF calculations. *J Comput Phys*, 2009, 228(15): 5490-525
- 18 Wu Jintao, Dong Gang, Li Baoming. Parallel chemistry acceleration algorithms based on ISAT method in gaseous detonation computations. *Computers and Fluids*, 2018, 167: 265-284
- 19 Shi J, Zhang YT, Shu CW. Resolution of high order WENO schemes for complicated flow structures. *J Comput Phys*, 2003, 186(2): 690-696
- 20 Brown PN, Byrne GD, Hindmarsh AC. VODE. A variable coefficient ODE solver. *SIAM J. Sci. and Stat. Comput.*, 1989, 10(5): 1038-1051
- 21 Burke MP, Chaos M, Ju Y, et al. Comprehensive H₂/O₂ kinetic model for high-pressure combustion. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2012, 44(7): 444-474
- 22 Dong G, Fan B C, Ye J F. Numerical investigation of ethylene flame bubble instability induced by shock waves. *Shock Waves*, 2008, 17(6): 409-419
- 23 Jiang H, Dong G, Chen X, et al. A parameterization of the Richtmyer-Meshkov instability on a premixed flame interface induced by the successive passages of shock waves. *Combustion and Flame*, 2016, 169: 229-241
- 24 陈霄, 董刚, 蒋华, 等. 多次激波诱导正弦扰动预混火焰界面失稳的数值研究. *爆炸与冲击*, 2017, 37(2): 229-236 (Chen Xiao, Dong Gang, Jiang Hua, et al. Numerical studies of sinusoidally premixed flame interface instability induced by multiple shock waves. *Explosion and Shock Waves*, 2017, 37(2): 229-236 (In Chinese))
- 25 Chen X, Dong G, Li B. Numerical study of three-dimensional developments of premixed flame induced by multiple shock waves. *Acta Mechanica Sinica*, 2018, 34(6): 1035-1047

CHEMISTRY ACCELERATION ALGORITHMS BASED ON THE TABULATION AND APPLICATIONS IN NUMERICAL SIMULATIONS OF GASEOUS DETONATIONS

Dong Gang^{*}, Wu Jintao, Liu Yunfeng⁺

^{*}(Key Laboratory of Transient Physics, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)

⁺(LHD, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract: Due to the huge computational cost of numerical simulations of compressible reactive flows with detailed elementary reactions, the improvement of computational efficiency for the simulations is necessary without the loss of computational accuracy. This work propose a series of parallel algorithms based on the *in situ* adaptive tabulation (ISAT) technique under the frame of MPI. The algorithms are composed of primary strategy (including PLP and TP) and balanced strategy (including DEP and DAP). The algorithms have applied in the simulations of two-dimensional gaseous detonations, and the several factors such as strategy, reaction mechanism, numerical resolution and table size, are examined to identify the computational efficiency and accuracy. The results show that the chemical speedup ratios of 3~5 can be reached for most of computational conditions and suggest the good computational efficiency, without the loss of computational accuracy. The results also indicate that the computational efficiency is closely related to the table operations among the tables. The load balance and the synchronization among the table operations take the important roles in the improvement of computational cost.

Key words: tabulation, chemistry acceleration, gaseous detonation, computational accuracy and efficiency, numerical simulation