

(Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Республика Казахстан)

## **АКТУАЛЬНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ CUDA ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПОДЗЕМНОГО ХРАНЕНИЯ ВОДОРОДА**

**Аннотация.** В данной работе исследован процесс хранения водорода с биотической реакцией, связанной с динамической системой уравнений популяций в водоносном резервуаре. Получены численные результаты с помощью CUDA технологии. А также проведены сравнения скорости вычисления на GPU и на CPU.

**Ключевые слова:** пористая среда, водород, бактерия, нейстон, хемотаксис, динамика популяций, осцилляция, CUDA, GPU, CPU, global memory, shared memory, SM.

**Тірек сөздер:** кеуек орта, сутегі, бактерия, нейстон, хемотаксис, популяция динамикасы, осцилляция, CUDA, GPU, CPU, global memory, shared memory, SM.

**Keywords:** porous media, hydrogen, bacteria, neuston, chemotaxis, population dynamics, oscillations, CUDA, GPU, CPU, global memory, shared memory, SM.

### **ВВЕДЕНИЕ.**

**Проблема подземного хранения водорода (ПХВ).** На сегодняшний день одна из очень острых проблем современной мировой энергетики является накопление и аккумуляция полученного избыточного большого объема энергии. Одним из наиболее перспективных решений проблемы аккумуляции большого объема энергии считается так называемая водородная энергетика, в которой в качестве подходящих материалов для аккумуляции больших объемов энергии используется водород. Главным достоинством водорода как топлива является то, что его удельная теплота сгорания втрое выше, чем у нефти, а при сгорании образуется экологически абсолютно безопасная вода.

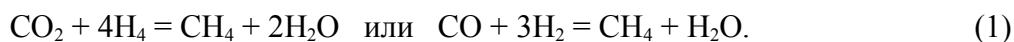
Таким образом, избыток энергии из ТЭС, ГЭС, АЭС можно использовать для получения водорода из воды. На сегодняшний день производство водорода и его распределение уже не представляют серьезных технических проблем. Однако при производстве водорода в большом объеме возникает проблема необходимости хранения больших объемов водорода. Одним из самых эффективных и недорогих способов хранения большого объема водорода является его закачка в геологические формации, такие как водоносные пласты, истощенные газовые месторождения или соляные каверны [1]. Несколько подземных хранилищ водорода имеется в Великобритании, в США, в России, в Германии, в Чехии и во Франции.

Весьма необычное поведение водорода при подземном хранении было обнаружено по данным наблюдений за составом смеси, добываемой из ПХВ (в ходе цикла «добыча», последующего за закачкой). Эти наблюдения выявили существование сильных осцилляций состава добываемого газа во времени и по пространству [2-3]. В частности, на хранилище Lobodice (Чехия) было обнаружено снижение во времени концентрации закачиваемых газов  $H_2$  и  $CO_2$ , но значительное увеличение концентрации  $CH_4$  [2].

Исходная закачанная смесь содержала 55%  $H_2$ , 20%  $CO_2 + CO$  и 20%  $CH_4$ . После нескольких месяцев закачки, хранения и начала цикла извлечения добываемый газ содержал 37%  $H_2$ , 12%  $CO_2 + CO$  и 40%  $CH_4$ . Таким образом, речь идет не о долях процентов и случайных ошибках измерений, а об удвоении количества  $CH_4$  в пласте и уменьшении в 2 раза количества  $CO_2 + CO$ . Характерный период изменения состава хранимого газа составил от 5 до 7 месяцев. Одновременно было обнаружено избыточное уменьшение давления в пласте на 15% по сравнению с расчетами материального баланса. Одной из возможных интерпретаций этого утечка газа была в итоге отвергнута.

Последующий изотопный анализ продукции из скважин [3] показал, что изотопный состав части добываемого  $CH_4$  отличен от  $CH_4$  закачиваемого. Речь идет, таким образом, о внутрипластовых генераторах  $CH_4$ . Дальнейшие наблюдения выявили еще более нетривиальные процессы в ПХВ, такие как образование чередующихся в пространстве зон, предпочтительно насыщенных  $H_2$  или  $CH_4$ . Назовем этот эффект естественной внутрипластовой сепарацией химических компонентов.

В работах Smigai и Vuzek [2, 3] сделана попытка объяснить причины изменения качественного состава закачиваемой смеси. В них предложено, что образование метана в пласте протекает по следующим реакциям:



В ходе этих реакций наблюдается сокращение количества  $CO_2$  и  $H_2$  и одновременное увеличение количества  $CH_4$ . Подобная реакция между  $H_2$  и  $CO_2$  может происходить в условиях ПХВ, для столь существенного изменения начального состава смеси требуются годы. Изменение концентрации смеси можно объяснить влиянием метаногенных бактерий, которые участвуют в реакции (1) и являются ее катализатором. Присутствие метаногенных бактерий в пластовой воде ПХВ Lobodice было подтверждено измерениями [2, 3].

Механизм воздействия бактерий представляет собой процесс метаболизма, при котором бактерии поглощают углерод из  $CO_2$  и электроны  $H_2$  в качестве энергии. В результате многостадийных процессов окисления  $CO_2$  в теле бактерии происходит образование метана, который в итоге и «выдыхается» [4].

Таким образом, процесс ПХВ представляет собой естественный химический реактор, поглощающий  $CO_2$  и частично  $H_2$  и удваивающий массу  $CH_4$ . Ясно, что данная проблема имеет промышленное значение, затрагивая как энергетику, так и экологию. Экономическая эффективность такого процесса можно оценить только после проведения физического и математического моделирования всех возможных вариантов поведения ПХВ. Разработка таких моделей является основной целью данной работы.

Первая попытка исследования образования метана при подземном хранении водорода проведена в работе [5], в которой бактерия рассматривалась как однородная среда в однофазной газовой среде без учета присутствия воды. В качестве модели рассмотрена модель Моно роста популяции, но в результате исследований были обнаружены лишь мелкие, быстро затухающие флуктуации концентраций метана в пласте, которые не объяснили многообразия наблюдаемых явлений.

В работе [6] рассматривается модель Тюринга, учитывающая существование различных структур колоний бактерий в зависимости от их численности. В работе [7] развивалась модель Тюринга с учетом двухфазности среды. Получена двухфазная модель хранения водорода с биотической реакцией, связанной с динамической системой уравнений популяций в водоносном резервуаре.

В данной работе предполагаем, что существует математическая двухфазная модель многокомпонентных потоков с биотической реакцией, связанной с динамической системой уравнений популяций. Далее численно решаем полученную модель с помощью CUDA технологии [8, 9]. А также проводим сравнения скорости вычисления на GPU с скоростью вычисления с одним потоком на CPU.

**1. Общая модель динамики популяции и химических компонентов.** Рассмотрим следующую физическую двухфазную модель (газ и вода): в подземный водоносный пласт, содержащий воду и газ, закачивается двухкомпонентная смесь  $H_2$  с небольшим содержанием  $CO_2$ . Газовая фаза в пласте состоит из трех химических компонентов:  $H_2$ ,  $CO_2$  и  $CH_4$ , а жидкая фаза состоит из воды с низкими концентрациями  $CO_2$ ,  $H_2$  и  $CH_4$ .

Далее рассмотрим только цикл закачки как наименее тривиальное. Присутствующие в пласте метаногенные бактерии выступают в роли активатора химической реакции между  $H_2$ - (1) и  $CO_2$ - (2) с образованием небольшого количества  $H_2O$ - (4) и  $CH_4$ - (3). В модели рассматривается два вида бактерий:

- 1) бактерии, присутствующие в воде как планктоны или биофильмы, которые прикреплены к стенам пор и покрыты водой;
- 2) бактерии, присутствующие в нейстоне;

Бактерии, живущие в воде, используют в качестве питательных веществ, растворенные  $H_2$  и  $CO_2$  в воде. Вода является биологически необходимой средой обитания для бактерий, живущих в нейстоне и использующих в качестве питательных веществ  $CO_2$ ,  $H_2$  из газовой фазы.

Кинетика реакций зависит от концентрации нескольких компонентов, которые приведут к рассмотрению больших систем, связанных с уравнением переноса. В случае неизменяемой реакции ситуация упрощается, так как кинетика реакции зависит только от реагентов и не зависит от реакции продуктов. Это достаточно, чтобы сформулировать уравнения переноса только для  $H_2$  и  $CO_2$ .

Пусть  $n_w(x,t)$  и  $n_{ns}(x,t)$  – число бактерий, находящихся в воде и в нейстоне в единице объема пористой среды. Принимая во внимание вышеупомянутые предположения, можно

сформулировать следующие уравнения динамики популяции и уравнения переноса для компонентов:

$$\frac{\partial n_{ns}(1-S)}{\partial t} = \eta_{ns}(1-S) \frac{c_g^{(2)} n_{ns}}{t_{e,ns}} - (1-S) \frac{n_{ns}}{t_d} + \text{div}(D_b(1-S) \text{grad} n_{ns}); \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_w S}{\partial t} = & \eta_w S \frac{c_w^{(1)} c_w^{(2)} (n_w)^2}{t_{e,w}} - S \frac{n_w}{t_d} + \text{div}(D_b S \text{grad} n_w) \\ & - \text{div}(D_{ch}(C^{(1)}) S n_w \text{grad} C^{(1)}) \end{aligned}; \quad (3)$$

$$k = 1, 2, 3:$$

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g c_g^{(k)} (1-S) + \rho_w c_w^{(k)} S) + \text{div}(\rho_g c_g^{(k)} V_g^{(k)} + \rho_w c_w^{(k)} V_w^{(k)}) = \frac{1}{\Omega} G^{inj} c^{(k),inj} \\ - \frac{\phi \gamma^{(k)} (1-\theta) c_g^{(2)} n}{t_{e,ns} (1+a_{ns} c_g^{(2)})} - \frac{\phi \gamma^{(k)} c_w^{(1)} c_w^{(2)} \theta^2 S n^2}{t_{e,w} \left( S^2 + \frac{\theta^2 n^2}{n_{wm}^2} \right) (1+a_{w1} c_w^{(1)}) (1+a_{w2} c_w^{(2)})} \end{aligned} \quad (4a)$$

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g (1-S) + \rho_w S) + \text{div}(\rho_g V_g + \rho_w V_w) = \frac{1}{\Omega} G^{inj}; \quad (4b)$$

$$V_g = -\lambda_g (\text{grad} P_g - \rho_g^m g), \quad V_w = -\lambda_w (\text{grad} P_w - \rho_w^m g), \quad \lambda_i = \frac{K k_i(S)}{\mu_i}; \quad (4c)$$

$$V_i^{(k)} = V_i + V_{iD}^{(k)}; \quad V_{iD}^{(k)} = -\frac{\phi D_i^{(k)} S_i}{c_i^{(k)}} \text{grad} c_i^{(k)}, \quad i = g, w \quad (4d)$$

$$P_w = P_g - P_c(S); \quad (4e)$$

$$c_g^{(3)} = 1 - c_g^{(1)} - c_g^{(2)} \quad (4f)$$

$$c_w^{(k)} = H^{(k)}(P_w) \cdot c_g^{(k)} \quad (4g)$$

где  $S$  – насыщенность воды,  $t_{e,w}$  и  $t_{e,ns}$  – характерные скорости роста популяции при малом количестве питательных веществ,  $t_d$  – характерное время вымирания,  $\eta$  – коэффициент пропорциональности между скоростью роста и поедания,  $D_b$  – коэффициент диффузии бактерий,  $D_{ch}(C)$  – коэффициент хемотаксиса бактерий,  $c_i^{(k)}$  – молярная доля химических компонентов  $k$  в фазе  $i$ ,  $C^{(k)}$  – общая молярная доля химических компонентов  $k$  в обе фазе,  $P$  – давление,  $\rho$  – молярная плотность,  $\mu$  – динамическая вязкость,  $K$  – абсолютная проницаемость,  $\phi$  – пористость,  $k_k(S)$  – фазовая проницаемость,  $\rho^m$  – массовая плотность,  $H^{(k)}(P_w)$  – коэффициент Генри,  $g$  – ускорение силы тяжести,  $P_c(S)$  – капиллярное давление,  $G^{inj}$  – молярная скорость закачиваемого газа,  $\Omega$  – общий объем хранилища,  $V_i$  – скорость Дарси,  $V_i^{(k)}$  – скорость переноса компоненты  $k$  в фазе  $i$ ,

$V_{iD}^{(k)}$  – скорость диффузии компоненты  $k$  в фазе  $i$ ,  $c^{(k),inj}$  – концентрация компоненты  $k$  в закачиваемом газе,  $\gamma^{(k)} = \begin{cases} 4/5, k = 1 \\ 1/5, k = 2 \end{cases}$ .

**2. Обобщенная модель Тюринга.** В общем случае, когда подземное хранилище водорода насыщено водой, то обобщением уравнений (4) и (6) получены дифференциальные уравнения для динамики метаногенных бактерий. Полученная модель принимает вид обобщенной модели Тюринга, в которой присутствует конвективный член  $div(\rho_w c_w^{(k)} V_w^{(k)})$  и хемотаксис  $-div(D_{ch}(C^{(1)}) S n_w grad C^{(1)})$ , в отличие от оригинальной модели Тюринга:

$$\begin{cases} \frac{\partial c_w^{(H_2)}}{\partial t} = q_1 - \alpha_1 c_w^{(H_2)} c_w^{(CO_2)} N^2 + \varepsilon_1 \cdot \Delta_{x,y} \cdot c_w^{(H_2)} \\ \frac{\partial c_w^{(CO_2)}}{\partial t} = q_2 - \alpha_2 c_w^{(H_2)} c_w^{(CO_2)} N^2 + \varepsilon_2 \cdot \Delta_{x,y} \cdot c_w^{(CO_2)} \\ \frac{\partial N}{\partial t} = -\beta \cdot N + \alpha_3 \cdot c_w^{(H_2)} c_w^{(CO_2)} N^2 + D_b \cdot \Delta_{x,y} \cdot N - D_{ch} \cdot \nabla_{x,y} \cdot (\exp(-\lambda_{ch} c_w^{(H_2)}) \cdot N \cdot \nabla_{x,y} \cdot c_w^{(H_2)}) \end{cases} \quad (5)$$

где

$$\rho_k = (\rho_g(1-S) + \rho_w H^{(k)} S), \quad q_k = \frac{G^{inj} c^{(k),inj}}{\Omega \phi \rho_k}, \quad \varepsilon_k = \frac{\rho_g D_g^{(k)} \phi (1-S) + \rho_w D_w^{(k)} H^{(k)} (1-S)}{\rho_k},$$

$$\alpha_1 = \frac{4 \cdot H^{(1)} \cdot H^{(2)} \cdot S}{5 \cdot t_{e,w} \rho_1}, \quad \alpha_2 = \frac{H^{(1)} \cdot H^{(2)} \cdot S}{5 \cdot t_{e,w} \rho_2}, \quad \alpha_3 = \frac{\eta_w H^{(1)} \cdot H^{(2)} \cdot S}{t_{e,w}}, \quad \beta = \frac{1}{t_d}$$

Поскольку водород малорастворим в воде, чем углекислый газ, то достаточно рассматривать асимптотическую модель:

$$\begin{cases} \frac{\partial c_w^{(H_2)}}{\partial t} = q - \alpha_1 c_w^{(H_2)} \cdot N^2 + \varepsilon_1 \cdot \Delta_{x,y} \cdot c_w^{(H_2)} \\ \frac{\partial N}{\partial t} = -\beta \cdot N + \alpha_3 \cdot c_w^{(H_2)} \cdot N^2 + D_b \cdot \Delta_{x,y} \cdot N - D_{ch} \cdot \nabla_{x,y} \cdot (\exp(-\lambda_{ch} c_w^{(H_2)}) \cdot N \cdot \nabla_{x,y} \cdot c_w^{(H_2)}) \end{cases} \quad (6)$$

с начальным и граничным условием:

$$N|_{t=0} = 1, \quad c_w^{(H_2)}|_{t=0} = 1, \quad \frac{\partial c_w^{(H_2)}}{\partial \nu}|_{\partial \Omega} = 0, \quad \frac{\partial N}{\partial \nu}|_{\partial \Omega} = 0 \quad (7)$$

Предложенная модель (6)-(7) учитывает хемотаксис и диффузию бактерий и газа в пространстве и позволяет исследовать изменение концентрации водорода при подземном хранении водорода.

Для решения (6) и (7) двумерной задачи до стационарного случая требуется использование CUDA технологии. Где  $q$  означает, что подземный водоносный пласт закачивается  $H_2$  во всех точках. Область движения прямоугольник, а возмущение

передается через малую окрестность начало координат. На границе поддерживается условия непроницаемости. В начальном состоянии имеется непрерывно распределенная во всем пласте колония бактерий и постоянная начальная концентрация  $H_2$ .

Таблица 1 – Расчетные данные:

$dx = dy$	0.025
dt	0.004
Число итерации	1000000
q ( на скважине)	0.95+0,01
q (остальных точках поддерживается дебит)	0.95
$D_w^{(H_2)}$	0.01
$D_b$	0.001
$D_{ch}$	0.001
$\alpha_1$	1
$\alpha_3$	1
$\beta$	1
$\lambda_{ch}$	1

**3. Численная реализация на CUDA.** CUDA – это новая технология параллельного програм-мирования, разработанная NVIDIA, использующая вычислительную мощность GPU. В данной технологии вычисления производятся на множестве ядер CUDA, сгруппированных в некоторое число потокового мультипроцессора (далее SM). Технология CUDA, в отличие от технологии MPI, является системой с общей памятью (global memory). Отличительным свойством для этой памяти является то, что можно делать обращение этой памяти с любого SM. Однако из за большого времени отклика общей памяти приводит к значительному уменьшению скорости вычисления. Чтобы увеличит скорость вычисления, используется разделяемая память (shared memory), которая имеет небольшой объем в каждом SM. На таблице 2 показано технические характеристики компьютера использованного для численного исследования задач ПХВ:

Таблица 2 – Технические характеристики компьютера

Процессор	Intel(R) Core(TM) i7-3820 CPU @ 3.60GHz, 3601 МГц, ядер: 4, логических процессоров: 8
Видеокарта	GeForce GTX 690 Частота GPU – 915МГц Ядер CUDA – 2 x 1536 Объем видеопамяти – 2 x 2048 Мб Частота видеопамяти – 6008 МГц
Компилятор	GCC 4.8.1

Для решения задач (6)-(7) использовался итерационный явный метод Якоби, который в свою очередь очень легко реализуется с помощью технологии CUDA для GPU. Расчетная область в GPU было разделено на блоки с размерностью (16x16), кроме этого использовался разделяемая память для данных, запрос на которых происходит более быстро. Отрывок CUDA кода предоставлен ниже:

```
__global__ void Concentration ( float *C, float *C1, float *N, float *N1, float Dw, float *Q, float q,
```

```
float ht, float hx, float hy, int Nx, int Ny)
```

```
{
```

```
    __shared__ float buf1[16][16];
```

```
    __shared__ float buf2[16][16];
```

```
    int i = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;
```

```
    int j = blockIdx.y * blockDim.y + threadIdx.y;
```

```
    int id0 = i*Ny + j;
```

```
    int id1 = (i+1)*Ny + j;
```

```
    int id2 = (i-1)*Ny + j;
```

```
    int id3 = i*Ny + j+1;
```

```
    int id4 = i*Ny + j-1;
```

```
    int tx = threadIdx.x;
```

```
    int ty = threadIdx.y;
```

```
    if ((i < Nx) && (j < Ny))
```

```

{
    buf1[tx][ty] = C[id0];
    buf2[tx][ty] = N[id0];
}
syncthreads();
if ( i>=1 && i<=Nx-2 && j>=1 && j<=Ny-2 )
{
    if (i==1 && j==1)
        C1[id0] = buf1[tx][ty] + ht*( Q[id0]+0*q+0.01f - buf1[tx][ty]*buf2[tx]
[ty]*buf2[tx][ty]+
        Dw * ( (C[id1]-2*buf1[tx][ty]+C[id2])/hx/hx + (C[id3]-2*buf1[tx][ty]
+C[id4])/hy/hy ));
    else
        C1[id0] = buf1[tx][ty] + ht*( Q[id0]+0*q - buf1[tx][ty]*buf2[tx][ty]*buf2[tx][ty]
+
        Dw * ( (C[id1]-2*buf1[tx][ty]+C[id2])/hx/hx + (C[id3]-2*buf1[tx][ty]
+C[id4])/hy/hy ));
}
syncthreads();
if ( i>=0 && i<=Nx-1 && j>=0 && j<=Ny-1)
{
    if (i==0)
        C1[0*Ny+j] = C1[2*Ny+j];
    else if (i==Nx-1)
        C1[(Nx-1)*Ny+j] = C1[(Nx-3)*Ny+j];
    else if (j==0)
        C1[i*Ny+0] = C1[i*Ny+2];
    else if (j==Ny-1)
        C1[i*Ny+Ny-1] = C1[i*Ny+Ny-3];
}

```



```

}

__global__ void Number_bacteria( float *N, float *N1, float *C, float *C1,

                                float Db, float Dch, float Kch,

                                float ht, float hx, float hy,

                                int Nx, int Ny)

{

    __shared__ float buf1[16][16];

    __shared__ float buf2[16][16];

    int i = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;

    int j = blockIdx.y * blockDim.y + threadIdx.y;

    int kk = i*Ny + j;

    int id0 = i*Ny + j;

    int id1 = (i+1)*Ny + j;

    int id2 = (i-1)*Ny + j;

    int id3 = i*Ny + j+1;

    int id4 = i*Ny + j-1;

    int tx = threadIdx.x;

    int ty = threadIdx.y;

    if ((i < Nx) && (j < Ny))

    {

        buf1[tx][ty] = N[kk];

        buf2[tx][ty] = C[kk];

    }

    syncthreads();

    if ( i>0 && i<Nx-1 && j>0 && j<Ny-1)

    {

        N1[id0] = buf1[tx][ty] + ht * ( - buf1[tx][ty] + buf2[tx][ty]*buf1[tx][ty]*buf1[tx]
[ty] +

```

```

        Db * ( (N[id1]-2*buf1[tx][ty]+N[id2])/hx/hx + (N[id3]-2*buf1[tx][ty]
+N[id4])/hy/hy ) -
        Dch * ( exp(-Kch*C[id1])*N[id1]*(C[id1]-buf2[tx][ty])/hx -
        exp(-Kch*buf2[tx][ty])*buf1[tx][ty]*(buf2[tx][ty]-C[id2])/hx ) / hx -
        Dch * ( exp(-Kch*C[id3])*N[id3]*(C[id3]-buf2[tx][ty])/hy -
        exp(-Kch*buf2[tx][ty])*buf1[tx][ty]*(buf2[tx][ty]-C[id4])/hy ) / hy );
    }
syncthreads();
if ( i>=0 && i<=Nx-1 && j>=0 && j<=Ny-1)
{
    if (i==0)
        N1[0*Ny+j] = N1[2*Ny+j];
    else if (i==Nx-1)
        N1[(Nx-1)*Ny+j] = N1[(Nx-3)*Ny+j];
    else if (j==0)
        N1[i*Ny+0] = N1[i*Ny+2];
    else if (j==Ny-1)
        N1[i*Ny+Ny-1] = N1[i*Ny+Ny-3];
}
}

```

**4. Анализ вычислительных результатов.** Целью данного исследования являлась демонстрация эффективности использования CUDA технологии при решении задач ПХВ. Кроме этого, было замечено линейное увеличение вычислительной скорости в зависимости от расчетной области (рисунки 1 и 3) при использовании CUDA технологии:

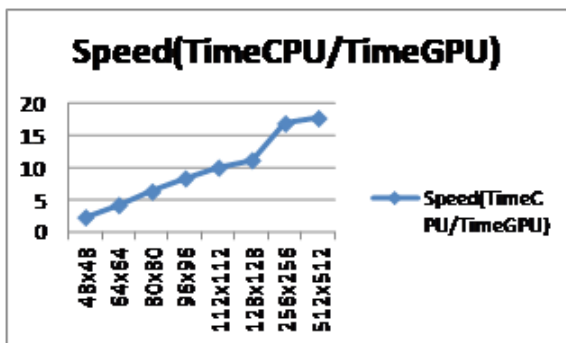


Рисунок 1 – Скорость вычисления в зависимости

от размера сетки без учета хемотаксиса

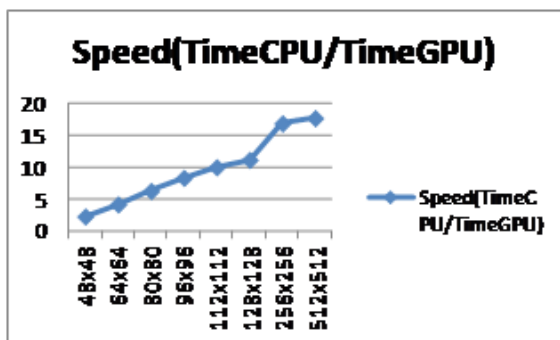


Рисунок 3 – Скорость вычисления в зависимости

от размера сетки с учетом хемотаксиса

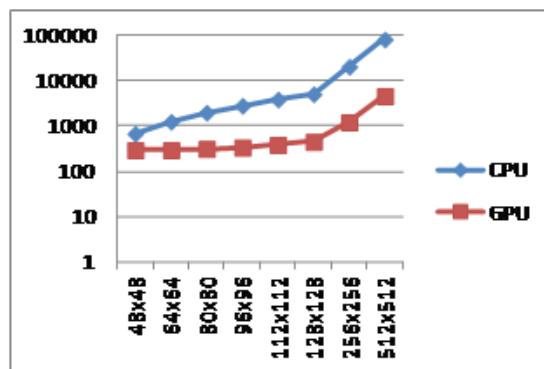
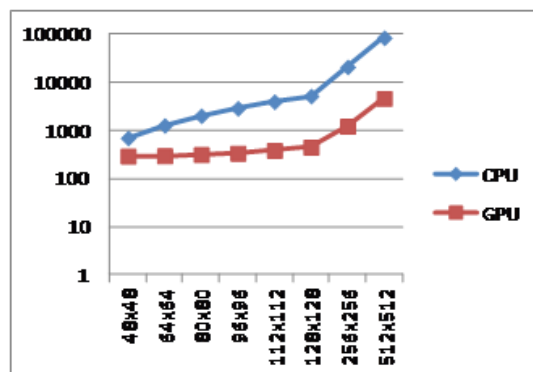


Рисунок 2 – Время вычисления (в секундах) в зависимости от размера сетки без учета хемотаксиса



Рисунки 4 – Время вычисления (в секундах) в зависимости от размера сетки с учетом хемотаксиса

На рисунке 5 представлен результат численного расчета эволюции концентрации бактерии без учета хемотаксиса с расчетными данными из таблицы 1. Полученные результаты показывают, что при диффузионном движении бактерий в конечном итоге бактерии группируются в симметрично расположенные круги.

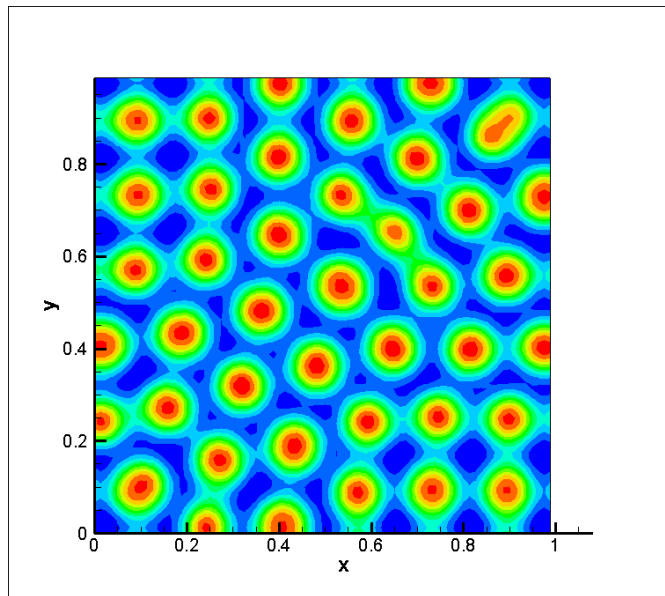


Рисунок 5 – Изменения количество бактерий в пространстве при  $Time = 0.160000$  с учетом диффузий

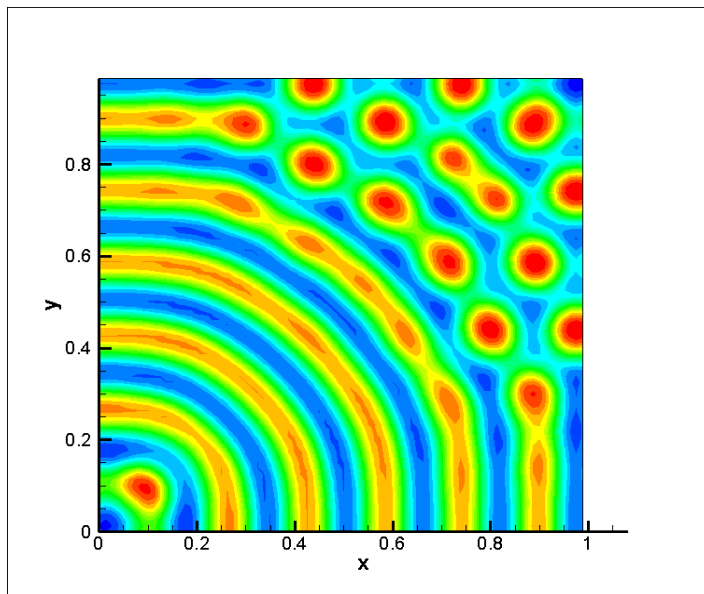


Рисунок 6 – Изменения количество бактерий в пространстве при  $Time = 0.160000$  с учетом диффузий и хемотаксиса

На рисунке 6 представлены результаты расчета концентрации количества бактерий соответственно с учетом хемотаксиса при  $Time = 0.160000$ . Результаты численного расчета показывают, что хемотаксис приводит к потере симметрии, то системы (6) и (7) сохраняют регулярные кольцевые волны и теряют симметрию. Чередование колец с избытком и недостатком бактерии означает, что в областях с высокой концентрацией

бактерий реакция (1) протекает быстрее, в результате чего метаногенные бактерии выделяют метан.

**Заключение.** Уравнения (3), (4) и (5) представляют собой связанную систему, которая описывает двухфазное хранение водорода с биотической реакцией, связанной с динамической системой уравнений популяций в водоносном резервуаре. Поведение подземного хранилища водорода очень сложное и чувствительное к кинетическим параметрам.

Полученные результаты с помощью параллельных вычислений на базе технологии CUDA позволили детально анализировать эволюцию бактерий в задачах ПХВ. Кроме этого, было замечено, что эволюция бактерии с учетом хемотаксиса при различных значениях коэффициента хемотаксиса  $Dch$ , образуют различные положения пространственных волн. Получено значительное увеличение вычислительной скорости с помощью технологии CUDA на GPU по сравнению с одним потоком CPU для задач ПХВ (рисунки 1-4).

## ЛИТЕРАТУРА

1 Bulatov G.G. Underground storage of hydrogen. Ph.D. Thesis. – Moscow Gubkin Oil and Gas University, 1979 (in Russian).

2 Smigai P., Greksak M., Kozankova J., Buzek F., Onderka V., Wolf I. Methanogenic bacteria as a key factor involved in changes of town gas in an underground reservoir // FEMS Microbiol. Ecol. 73, 1990. P. 221-224.

3 Buzek F., Onderka V., Vancura P., Wolf I. Carbon isotope study of methane production in a town gas storage reservoir // Fuel 73(5), 1994: 747-752.

4 Gusev M.V., Mineeva L.A. (eds.): Microbiology. – Moscow Lomonosov University, Moscow (1992) (in Russian).

5 Panfilov M., Gravier G., Fillacier S. Underground storage of  $H_2$  and  $H_2-CO_2-CH_4$  mixtures // In: Proc. ECMOR-X: 10th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, 4–7 September 2006 Amsterdam, the Netherlands / Ed. EAGE, 2006, paper A003.

6 Panfilov M. Underground storage of hydrogen: self-organisation and methane generation // Transport in Porous Media, 85, 2010: P. 841-865.

7 Toleukhanov A., Panfilov M., Panfilova I., Kaltayev A. Bio-reactive two-phase transport and population dynamics in underground storage of hydrogen: natural self-organisation // In: Proc. ECMOR-XIII: 13th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, 10–13 September 2012 Biarritz, France / Ed. EAGE, 2012, paper B09.

8 NVIDIA, CUDA C PROGRAMMING GUIDE, July 2013.

9 Shane Cook. CUDA PROGRAMMING, A developer's guide to parallel computing with GPU. – Morgan Kaufmann, 2013. – P. 576.

## REFERENCES

1 Bulatov G.G. Underground storage of hydrogen. Ph.D. Thesis, Moscow Gubkin Oil and Gas University, 1979 (in Russian).

2 Smigai P, Greksak M., Kozankova J., Buzek F., Onderka V., Wolf I. Methanogenic bacteria as a key factor involved in changes of town gas in an underground reservoir. FEMS Microbiol. Ecol. 73, 1990: P 221-224.

3 Buzek F., Onderka V., Vancura P., Wolf I. Carbon isotope study of methane production in a town gas storage reservoir. Fuel 73(5), 1994: 747-752.

4 Gusev M.V., Mineeva L.A. (eds.). Microbiology. Moscow Lomonosov University, Moscow (1992) (in Russian)

5 Panfilov M., Gravier G., Fillacier S. Underground storage of H<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>-CH<sub>4</sub> mixtures. In: Proc. ECMOR-X: 10th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, 4–7 September 2006 Amsterdam, the Netherlands, Ed. EAGE, 2006, paper A003.

6 Panfilov M. Underground storage of hydrogen: self-organisation and methane generation. Transport in Porous Media, 85, 2010: P. 841-865.

7 Toleukhanov A., Panfilov M., Panfilova I., Kaltayev A. Bio-reactive two-phase transport and population dynamics in underground storage of hydrogen: natural self-organisation. In: Proc. ECMOR-XIII: 13th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, 10–13 September 2012 Biarritz, France, Ed. EAGE, 2012, paper B09.

8 NVIDIA, CUDA C PROGRAMMING GUIDE, July 2013.

9 Shane Cook, CUDA PROGRAMMING, A developer's guide to parallel computing with GPU, Morgan Kaufmann, 2013, p. 576.

## Резюме

*А. Б. Қолдас, А. Е. Төлеуханов*

(әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан Республикасы)

ЖЕР АСТЫ СУТЕГІН САҚТАУ ЕСЕБІН CUDA ТЕХНОЛОГИЯСЫ НЕГІЗІНДЕ

## ШЕШУДІҢ ӨЗЕКТІЛІГІ

Бұл жұмыста жер асты суы бар резервуарда сутегін сақтаудың бактериялардың динамикасын ескере отырып екі фазалы моделі қарастырылған. Қарастырылып отырған есептің сандық шешімін CUDA техно-логиясын пайдаланып шешкен. Сонымен қатар GPU мен CPU да есептің шығарылу жылдамдықтары салыс-тырылған.

**Тірек сөздер:** кеуек орта, сутегі, бактерия, нейстон, хемотаксис, популяция динамикасы, осцилляция, CUDA, GPU, CPU, global memory, shared memory, SM.

### Summary

*A. Koldas, A.E. Toleukhanov*

(Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Republic of Kazakhstan)

### ACTUALITY APPLICATION OF CUDA TECHNOLOGY TO SOLVE THE PROBLEM OF UNDERGROUND HYDROGEN STORAGE

In the present paper we develop the new mathematical model of gas-water multicomponent flow with biotic reactions coupled with the system of equations of population dynamics. We obtain numerical results using CUDA technology. And analyzed comparing the rate computation on the GPU and the CPU.

**Keywords:** porous media, hydrogen, bacteria, neuston, chemotaxis, population dynamics, oscillations, CUDA, GPU, CPU, global memory, shared memory, SM.

*Поступила 12.09.2013г.*