

Ускорение расчетов на графических процессорах при исследовании течения Стокса методом граничных элементов*

О.А. Солнышкина^{1,2}, Ю.А. Иткулова^{1,2}, Н.А. Гумеров^{1,3}

Центр “Микро- и наномасштабная динамика дисперсных систем”, Башкирский государственный университет, Уфа¹,
Институт механики, Уфимского научного центра РАН, Уфа²
Institute for Advanced Computer Studies, University of Maryland, USA³

В работе исследуется динамика двух вязких несмешивающихся жидкостей в неограниченной области и течение вязкой жидкости в канале сложной геометрии в трехмерной постановке. Численная методика основывается на методе граничных элементов, используются неструктурированные треугольные сетки. При увеличении масштаба задач возникает нехватка памяти вычислительной системы. Эта проблема решалась заменой прямого метода решения итерационным GMRES. Для ускорения расчетов разработан модуль матрично-векторного произведения «на лету» и распараллелен на графических процессорах (GPU). Проведено сравнение полученных численных результатов с аналитическими решениями. Представлены результаты по эффективности использования GPU.

1. Введение

Детальное исследование динамики дисперсных систем является актуальной проблемой современной науки и техники. Так, например, эмульсии широко используются в нефтяной промышленности. Существуют два типа эмульсий: эмульсии, закачиваемые в пористый пласт для увеличения нефтеотдачи, и эмульсии, образующиеся при нагнетании в пласт воды для вытеснения нефти, которая перемешивается с нефтью. Поэтому важно разработать эффективный численный аппарат, позволяющий детально исследовать поведение эмульсий, включая взаимодействие капель, их коалесценцию, и наблюдать многие эффекты на микроуровне в подобных системах «жидкость-жидкость».

В то же время на сегодняшний день нет однозначных представлений об их поведении при движении в пористых средах или микроканалах сложной геометрии, которые моделируют пористый пласт. Недавно был обнаружен эффект динамического запираания водонефтяных эмульсий в микроканалах, который заключается в том, что течение эмульсий со временем прекращается, несмотря на постоянно действующий перепад давления [9]. Этот эффект носит как положительные, так и отрицательные черты, которые влияют на величину дебита скважин, но его механизм до сих пор не изучен.

В работе исследуются трехмерные течения Стокса двух вязких несмешивающихся жидкостей в неограниченной области [6] и несжимаемой вязкой жидкости в канале переменного сечения сложной геометрии. Рассматриваемые задачи будут лежать в основе численного исследования эффекта динамического запираания эмульсий в микроканалах. Метод граничных элементов для Стоксовых течений изложен в [4] и успешно применялся для расчета течений в каналах [5] и взаимодействия капель и частиц в дисперсных течениях [8], в которых также можно найти обзор литературы.

Для решения поставленных задач используются новые эффективные подходы к численному моделированию трехмерных задач и современные информационные технологии. Численная методика основывается на методе граничных элементов, что уменьшает раз-

*Работа выполнена при поддержке Министерства по образованию и науки Российской Федерации, грант №11.G34.310040

мерность задачи на единицу. Используются неструктурированные треугольные сетки, точно описывающие границу области, что позволяет моделировать процессы в геометрически сложных объектах.

Программная реализация задач предусматривает выбор оптимальных алгоритмов в зависимости от количества узлов сетки. Для ускорения расчетов разработан модуль матрично-векторного произведения без хранения матрицы в памяти вычислительной системы, который используется в итерационном решателе GMRES, и распараллелен как на обычном многоядерном процессоре (CPU), так и на графических процессорах (GPU) с использованием технологии CUDA.

2. Трехмерное численное моделирование динамики капли в неограниченном потоке жидкости

2.1. Математическая модель

Постановка задачи об обтекании капли ньютоновской жидкости плотности ρ_2 и вязкости μ_2 потоком другой ньютоновской жидкости плотности ρ_1 и вязкости μ_1 приведена, например, в [6] и заключается в следующем. Рассматриваемые жидкости занимают объём V_2 и V_1 соответственно, S — граница раздела фаз. Гравитационная постоянная g и коэффициент поверхностного натяжения капли γ постоянны. На бесконечности скорость потока обтекающей каплю жидкости 1 равна $\mathbf{u}_\infty(\mathbf{x})$. При числах Рейнольдса Re_1 , Re_2 значительно меньше 1, поведение потока жидкости 1, обтекающего каплю, и поведение жидкости 2 внутри капли описывается уравнениями Стокса

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_i = -\nabla p + \mu_i \nabla^2 \mathbf{u}_i = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ — тензор напряжений; p — давление, которой включает гидродинамические компоненты.

Условия на границе двух жидкостей

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \mathbf{u}, \quad \mathbf{f} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_2 = f \mathbf{n}, \\ f = \gamma(\nabla \cdot \mathbf{n}) + (\rho_1 - \rho_2)(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in S, \end{aligned} \quad (2)$$

где \mathbf{f} — поверхностное напряжение; \mathbf{n} — нормаль к поверхности, направленная в жидкость 1.

Условие на бесконечности

$$\mathbf{u}_1(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Кинематическое условие, описывающее динамику капли

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}, \quad \mathbf{x} \in S. \quad (4)$$

2.2. Численное моделирование

Задача решалась методом граничных элементов [10]. Суть метода состоит в преобразовании дифференциального уравнения в частных производных, описывающего поведение неизвестной функции внутри и на границе области, в интегральное уравнение, определяющее только граничные значения, и поиске численного решения этого уравнения. Если требуется найти значения потенциала во внутренних точках области, то их можно вычислить, используя известные решения на границе. Таким образом, размерность задачи уменьшается на единицу.

Для данной поверхности S скорость \mathbf{u} в произвольной точке \mathbf{y} может быть вычислена через граничные интегралы [8], [6]

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{y} \in V_1, \quad \mathbf{u}(\mathbf{y}) - 2\mathbf{u}_\infty(\mathbf{y}) \\ \mathbf{y} \in V_2, \quad \lambda \mathbf{u}(\mathbf{y}) \\ \mathbf{y} \in S, \quad \frac{1+\lambda}{2} \mathbf{u}(\mathbf{y}) - \mathbf{u}_\infty(\mathbf{y}) \end{array} \right\} = \int_S \left\{ -\frac{1}{\mu} \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) - (1-\lambda) [\mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})] \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) \right\} dS(\mathbf{x}), \quad (5)$$

где $\mu = \mu_1$ — вязкость обтекающей жидкости; $\lambda = \mu_2/\mu_1$ — отношение вязкостей внутренней и внешней жидкостей; \mathbf{G} — фундаментальное решение уравнения Стокса; \mathbf{T} — тензор напряжений, определяются как

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{8\pi} \left(\frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3} \right), \quad \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\frac{3}{4\pi} \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^5}, \quad (6)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{y}, \quad r = |\mathbf{r}|.$$

Поверхность S разбивается на N узлов \mathbf{x}_i , по которым мы строим квадратурные формулы граничных интегралов.

Используя метод вершинных коллокаций, последнее уравнение в граничных интегралах (5) в точках $\mathbf{y} = \mathbf{x}_j$ можно записать

$$\sum_{i=1}^N \left[\frac{1+\lambda}{2} \mathbf{I}_{ji} + (1-\lambda) \mathbf{I}_{ji}^{(T)} \right] \cdot \mathbf{u}_i = \mathbf{u}_{\infty,j} - \frac{1}{\mu} \sum_{i=1}^N \mathbf{I}_{ji}^{(G)} f_i, \quad j = 1, \dots, N, \quad (7)$$

$$\mathbf{I}_i^{(G)}(\mathbf{y}) = \int_{S_i} \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad (8)$$

$$\mathbf{I}_i^{(T)}(\mathbf{y}) = \int_{S_i} \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad (9)$$

где \mathbf{I}_{ji} — единичная матрица; остальные пространственные функции записаны в рассматриваемой точке коллокации.

Вычисление сингулярных элементов производилось методом пробных функций на основе известных интегральных тождеств [4].

Решая систему линейных алгебраических уравнений (7), получаем компоненты скорости на границе.

Поверхность аппроксимируется сеткой с треугольными элементами. Начальная сетка создается стандартными процедурами триангуляции поверхности, в которых особое внимание уделяется качеству сетки, необходимому для аккуратного вычисления поверхностных интегралов. В процессе эволюции узлы сетки движутся согласно уравнению (4).

Наиболее трудоемкой процедурой является вычисление средней кривизны поверхности в каждом узле сетки. Средняя кривизна вычислялась двумя методами: контурных интегралов и установления параболоида [8]. Ошибка вычисления кривизны находилась из сравнения с аналитическим выражением для эллипсоида. Метод установления параболоида дает более точное значение средней кривизны с погрешностью не более 3%, но для его использования валентность всех узлов сетки должна быть не менее пяти.

2.3. Результаты тестирования для одиночной капли

На рис. 1 показана капля в начальный момент времени $t = 0$ и деформированная капля при $t = 10^{-5}$ с одинаковыми плотностями жидкостей $\rho_1 = \rho_2 = 10^3$, с вязкостью

обтекающей жидкости $\mu_1 = 10^{-3}$ и капли $\mu_2 = 2 \cdot 10^{-3}$, коэффициентом поверхностного натяжения $\gamma = 0,005$. Все переменные заданы в системе Си.

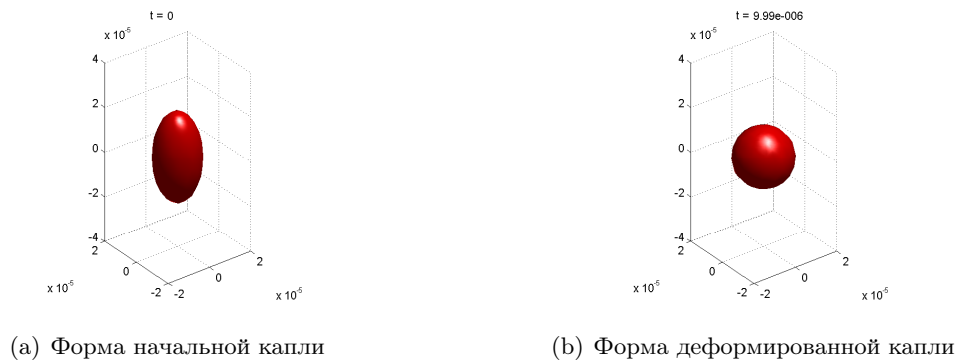


Рис. 1. Динамика капли

Из рисунков видно, что изначально эллипсоидальная капля под действием поверхностного натяжения приобретает сферическую форму. Число узлов сетки N варьировалось в пределах 600–3000.

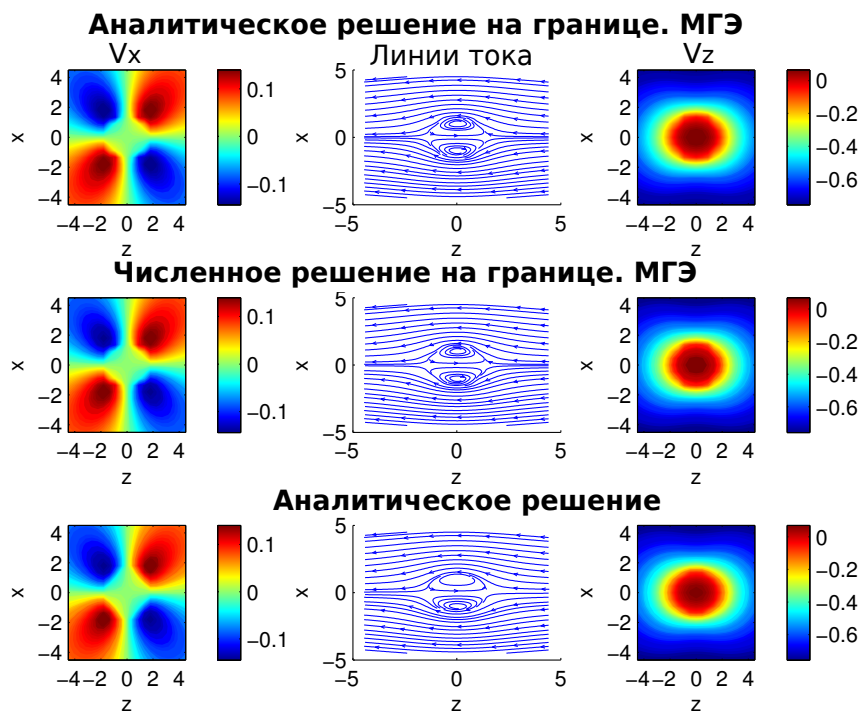


Рис. 2. Компоненты скоростей внутри и вне капли

Было проведено сравнение численного решения с аналитическим [11] в 3 этапа:

1. Компоненты скорости на границе капли, полученные аналитически, сравнивались с численными значениями, полученными методом граничных элементов. Погрешность составила 0,5 процента для $N = 2562$.

2. Компоненты скорости внутри и вне капли, полученные соответственно из первого и второго уравнений (5), используя для вычисления правой части точные значения $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ сравниваются с аналитическими решениями.
3. Компоненты скорости внутри и вне капли, полученные соответственно из первого и второго уравнений (5), используя для вычисления правой части численные значения $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ сравниваются с аналитическими решениями.

На рис. 2 показаны результаты, полученные на 2-ом и 3-ем этапах сравнения с аналитическим решением. Результаты сравнения показывают хорошее приближение численных расчетов к аналитическим с некоторой погрешностью, которая зависит от соотношения вязкостей рассматриваемых жидкостей λ и количества узлов дискретизации.

3. Трехмерное численное моделирование течения вязкой жидкости в канале переменного сечения

3.1. Математические модели периодического и непериодического потока

Рассматривалось течение вязкой несжимаемой жидкости с вязкостью μ в ограниченном канале переменного сечения с гладкой поверхностью S при малых числах Рейнольдса (рис. 3).

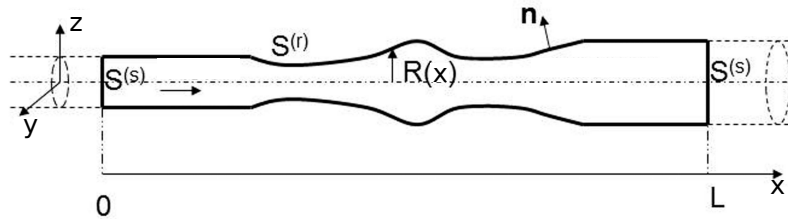


Рис. 3. Канал переменного сечения

Движение жидкости описывалось уравнениями Стокса (1).

Поверхность канала разбивалась на два подмножества: $S = S^{(s)} \cup S^{(r)}$, где $S^{(r)}$ — жесткая граница (боковая поверхность канала) и $S^{(s)}$ — мягкая граница (торцы канала). Задача решалась со следующими граничными условиями:

для непериодического потока

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in S, \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{f}^0(\mathbf{x}_0), \quad \mathbf{x}_0 \in S^{(s)}. \quad (10)$$

для периодического потока

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}) &= 0, \quad \mathbf{x} \in S^{(r)}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{f}^0(\mathbf{x}_0), \quad \mathbf{x}_0 \in S^{(s)}, \\ \mathbf{u}(0, y, z) &= \mathbf{u}(L, y, z), \quad \mathbf{f}(0, y, z) = -\mathbf{f}(L, y, z) + \mathbf{i}_x \Delta p. \end{aligned} \quad (11)$$

Обе постановки решались численно методом граничных элементов в нескольких модификациях.

Методы воплощены для произвольной трехмерной геометрии, в тестовой задаче аналитическая форма канала была осесимметричной.

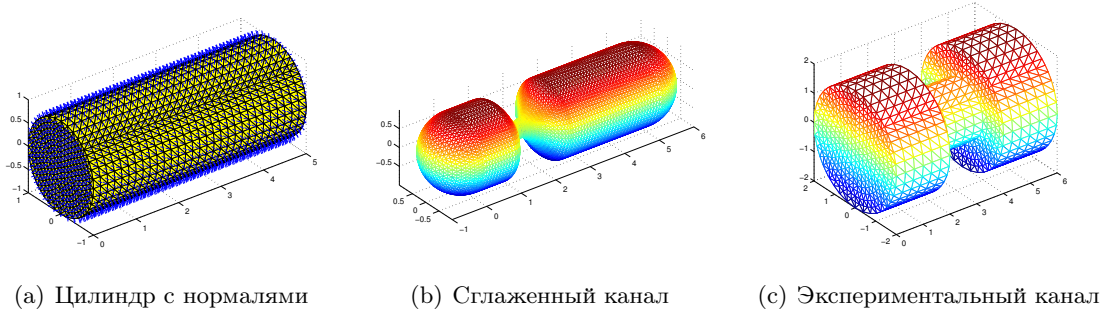


Рис. 4. Качественная триангуляция канала

На рис. 4 слева представлена триангуляция цилиндра с нормальными для моделирования течения Пуазейля, в центре — модель канала для неперидического потока, справа — модель экспериментального канала для периодического потока.

3.2. Метод граничных элементов в нескольких модификациях

Уравнения Стокса (1) переписывались в граничных интегралах [10], [4]. Сначала определялся вектор нормального напряжения \mathbf{f} на границе

$$\frac{1}{\mu} \int_S \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{u}^0(\mathbf{y}) - \int_S \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}^0(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \in S, \quad (12)$$

где \mathbf{G} , \mathbf{T} находились по формуле (6).

Затем, значения скорости \mathbf{u} в любой точке области \mathbf{y} вычислялись через граничные интегралы

$$\mathbf{u}(\mathbf{y}) = \frac{1}{\mu} \int_S \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + \int_S \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}^0(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \in V. \quad (13)$$

Для проверки достоверности полученных результатов, задача также была решена модифицированным методом граничных элементов, который заключается в следующем.

Нам известно точное решение для течения Пуазейля, которому задавалось возмущение

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^0 + \mathbf{f}', \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}^0 + \mathbf{u}'. \quad (14)$$

Граничные условия (10) для возмущений \mathbf{u}' и \mathbf{f}' выглядят следующим образом

$$\begin{aligned} \mathbf{u}' &= 0, \quad \mathbf{x} \in S^{(s)}, \quad \mathbf{u}' = -\mathbf{u}^0, \quad \mathbf{x} \in S^{(r)}, \\ \mathbf{f}'(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}_0) &= 0, \quad \mathbf{x}_0 \in S^{(s)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Из интегральных уравнений (12)–(13), которым удовлетворяют возмущения \mathbf{u}' и \mathbf{f}' , находились их значения. С учетом (14) определялся вектор нормального напряжения \mathbf{f} на границе и компоненты скорости \mathbf{u} в любой точке области.

Для периодического потока уравнения Стокса (1) переписывались в граничных интегралах

$$\frac{1}{2} \mathbf{u}(\mathbf{y}) - \int_S \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mu} \int_S \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \in S. \quad (16)$$

Интегральные уравнения (16) переписываются в матричном виде

$$\mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{B} \mathbf{f}, \quad \mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{I} - \mathbf{K}, \quad \mathbf{B} = \frac{1}{\mu} \mathbf{G}. \quad (17)$$

Граничные условия будут выглядеть

$$\mathbf{u}_1 = 0, \quad \mathbf{u}_2 = \mathbf{u}_3 = \mathbf{u}_s, \quad \mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_r, \quad \mathbf{f}_2 = \mathbf{f}_s, \quad \mathbf{f}_3 = -\mathbf{f}_s + \mathbf{f}_p, \quad \mathbf{f}_p = \mathbf{i}_x \Delta p, \quad (18)$$

где 1 — боковая поверхность; 2 — входное сечение; 3 — выходное сечение.

Из (16) получим систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных $(\mathbf{u}_s, \mathbf{f}_s, \mathbf{f}_r)$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{12} + \mathbf{A}_{13} & \mathbf{B}_{13} - \mathbf{B}_{12} & -\mathbf{B}_{11} \\ \mathbf{A}_{22} + \mathbf{A}_{23} & \mathbf{B}_{23} - \mathbf{B}_{22} & -\mathbf{B}_{21} \\ \mathbf{A}_{32} + \mathbf{A}_{33} & \mathbf{B}_{33} - \mathbf{B}_{32} & -\mathbf{B}_{31} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_s \\ \mathbf{f}_s \\ \mathbf{f}_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{13} \mathbf{f}_p \\ \mathbf{B}_{23} \mathbf{f}_p \\ \mathbf{B}_{33} \mathbf{f}_p \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Сингулярные интегралы рассчитывались, используя известные тестовые решения: постоянное и линейное течения.

3.3. Результаты тестирования для канала

Для тестирования программы использовался канал с входным и выходным сечением радиуса $R = 1$, радиусом сужения $r = 0,5$ и длиной $L = 5$.

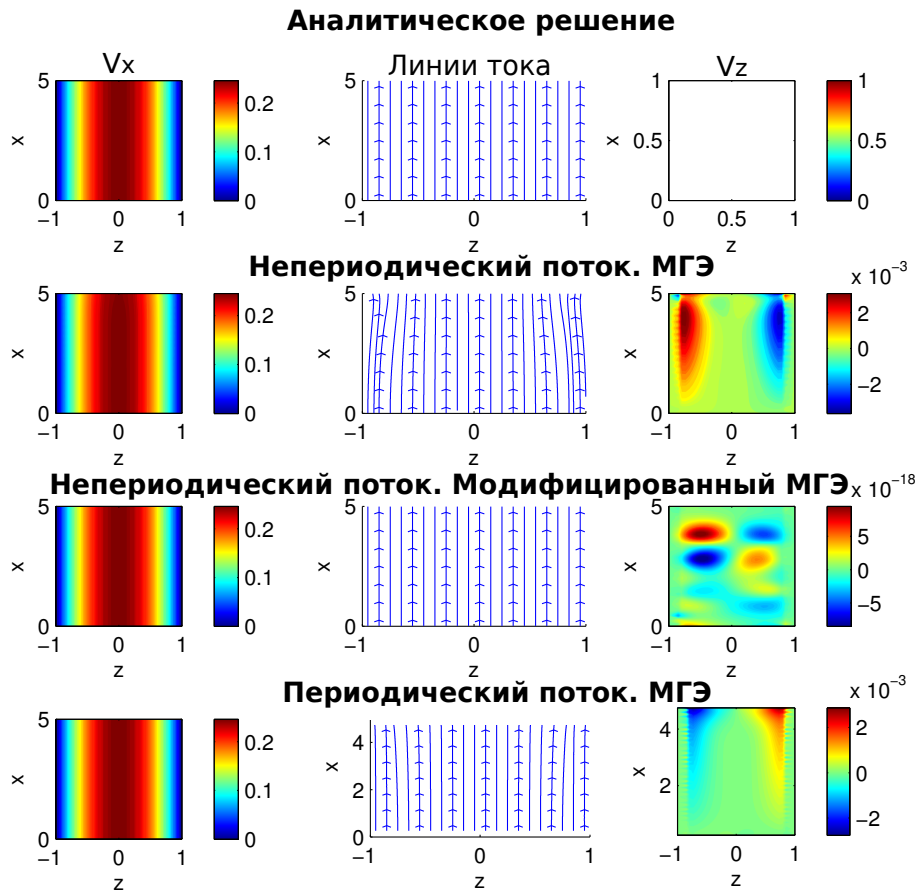


Рис. 5. Сравнение модификаций МГЭ с аналитическим решением

Проведено сравнение компонент вектора нормального напряжения \mathbf{f} на границе методом граничных элементов в нескольких модификациях с аналитическим решением для неперриодического течения Пуазейля. Погрешность вычисления неизвестных значений на границе составила порядка 0,7%. Для периодического потока погрешность компонент вектора нормального напряжения \mathbf{f} на границе составила порядка 0,24%, компонент вектора скорости \mathbf{u} около 0,9%.

На рис. 5 представлены поля скорости и линии тока, вычисленные в осевом сечении цилиндра плоскостью Oxz , для течения Пуазейля с $N = 2598$ в методе вершинных колокаций и $N = 2704$ в методе колокаций с центром в грани элемента. Из рисунка видно, что численные расчеты хорошо приближаются к аналитическому решению. Модифицированный метод граничных элементов, особенно для компонент скорости вдоль оси Oz , дает более точные результаты, по сравнению с обычным методом граничных элементов.

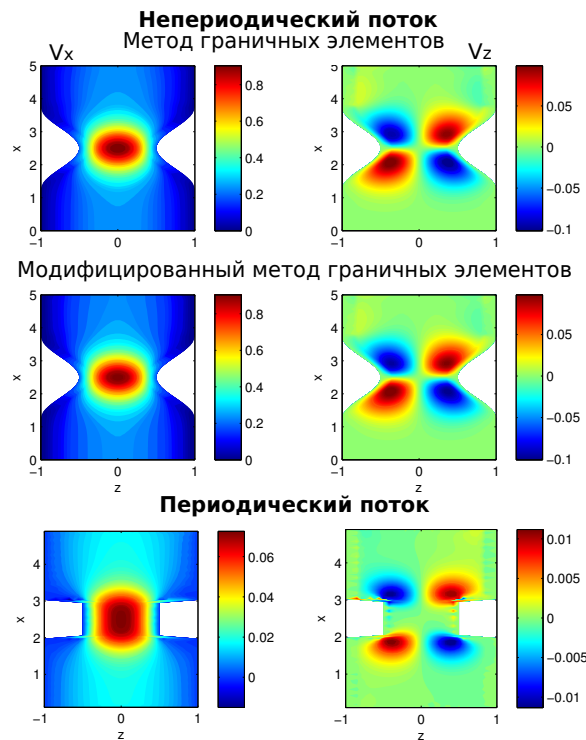


Рис. 6. Канал переменного сечения

Получены численные результаты для канала различного радиуса сужения методом граничных элементов в двух модификациях и проведено сравнение этих вариантов метода. В результате, относительная погрешность составила порядка 0,1-1,7% в зависимости от формы канала. По мере уменьшения радиуса сужения канала погрешность увеличивается и максимальное значение 1,7 % принимает на цилиндрическом канале. На рис. 6 представлены поля скорости для каналов разной геометрии и радиусом сужения $r = 0,5$. Сглаженный канал состоит из 2598 вершин и 5192 граней, экспериментальный — из 1354 вершин и 2704 граней. Таким образом, количество расчетных узлов N находится в пределах 3000 узлов. На границе сингулярные интегралы вычисляются неточно, что ведет к большой погрешности вычисления поля скорости в точках, лежащих близко к стенке канала. Наблюдаемый эффект на входе для периодического потока качественно совпадает с экспериментальным [1] и приближенным аналитическим решением [2].

4. Ускорение расчетов на графических процессорах

При трехмерном численном моделировании физических процессов для областей со сложной геометрией, например течение эмульсии в микроканалах переменного сечения, необходимо построение сеток с большим количеством узлов. Решение подобных многомасштабных задач требует разработки и применения эффективных численных методов. Для сеток маленького размера при решении СЛАУ применялись прямые методы, но при увеличении масштаба задачи их использование затрудняется. Это связано с тем, что размер необходимой памяти пропорционален квадрату числа узлов сетки, также при их увеличении возрастает время вычислений. При использовании прямых методов, начиная с некоторого количества узлов, возникает нехватка памяти вычислительной системы.

Эту проблему можно решить используя итерационные методы решения, которые существенно снижают затраты памяти и времени. Наиболее эффективными и устойчивыми среди итерационных методов решения таких систем уравнений являются так называемые проекционные методы, и особенно тот их класс, который связан с проектированием на подпространства Крылова (например, GMRES). Эти методы обладают целым рядом достоинств: они устойчивы, допускают эффективное распараллеливание, работу с различными строчными (столбцовыми) форматами и предобуславливателями разных типов [7].

Для эффективной программной реализации итерационного метода необходимо решить две проблемы:

1. разработать подпрограмму, быстро умножающую матрицу на вектор;
2. ускорить сходимость метода с помощью предобуславливателя.

В рамках данной работы для решения проблем, связанных с использованием памяти, в среде Matlab был разработан программный модуль умножения матрицы на вектор без хранения матрицы в памяти системы («MV product on the fly»), который используется в GMRES при решении СЛАУ. Каждый элемент матриц G и K вычислялся по следующим формулам:

$$G_{mn}^{ij} = S_n \mathbf{G}(\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_n) = \frac{1}{8\pi i} S_n \left(\frac{\delta_{ij}}{|\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_n|} - \frac{(x_m^i - x_n^i)(x_m^j - x_n^j)}{|\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_n|^3} \right),$$

$$K_{mn}^{ij} = S_n \mathbf{K}(\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_n) = -\frac{3}{4\pi i} S_n \frac{(x_m^i - x_n^i)(x_m^j - x_n^j)}{|\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_n|^5} \sum_{k=1}^N (x_m^k - x_n^k) n_n^k, \quad (20)$$

$$m, n = 1, \dots, N, \quad i, j, k = 1, 2, 3,$$

где N — количество узлов дискретизации области. Таким образом матрицы G и K имеют размер $3N \times 3N$ и $3N \times N$.

Применение модуля матрично-векторного произведения позволяет решить проблему ограничения по памяти вычислительной системы, но матричные вычисления являются вычислительно-трудоемкими, поэтому представляют собой классическую область применения параллельных вычислений. Для ускорения расчетов модуль был распараллелен на центральном многоядерном процессоре (CPU) средствами Matlab Parallel Computing Toolbox и с помощью программно-аппаратной технологии CUDA на графических процессорах (GPU) [3].

Использование графических процессоров для данной задачи обусловлено тем, что выполнение расчётов на GPU показывает отличные результаты в алгоритмах, использующих параллельную обработку данных (применение одной и той же последовательности математических операций к множеству данных). При этом лучшие результаты достигаются, если отношение числа арифметических инструкций к числу обращений к памяти достаточно велико.

Для многих методов матрично-векторных вычислений характерно наличие параллелизма по данным и в большинстве случаев распараллеливание таких операций сводится к разделению обрабатываемых матриц между процессорами используемой вычислительной системы. Наиболее общие способы разделения матриц состоят в разбиении данных на полосы (горизонтальные или вертикальные) или на прямоугольные фрагменты (блоки).

В рамках данной работы распараллеливание модуля «MV product on the fly» на GPU основывалось на разбиении матриц горизонтальными полосами на m частей так, что $N = m \times L$, где N — размерность матрицы, L — число строк матрицы в блоке, m — количество потоков на GPU.

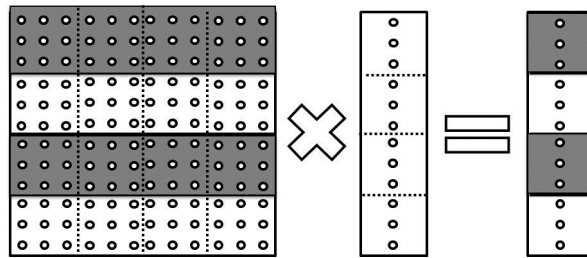


Рис. 7. Разделение данных и организация вычислений при выполнении параллельного модуля матрично-векторного произведения на GPU

На каждой итерации каждый из m потоков вычисляет свою часть вектора решения. То есть при умножении матрицы G размера $3N \times 3N$ на вектор b размера $3N \times 1$ на одной итерации поток вычисляет очередной свой блок матрицы размером 3×3 по формулам (20) и умножает полученный блок на соответствующую часть вектора b размером 3×1 и прибавляет результат к полученному на предыдущей итерации вектору (рис. 7). Каждый поток хранит часть результирующего вектора, которая по окончании вычислений копируется в global memory для получения полного вектора решения.

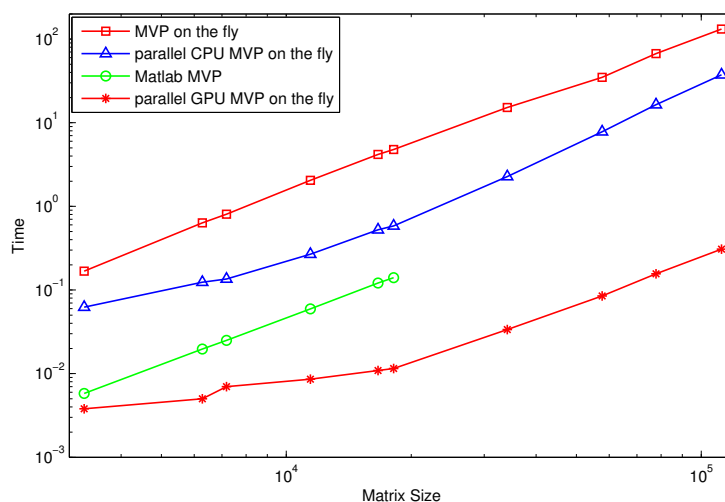


Рис. 8. Время вычисления матрично-векторного произведения

На рис. 8 показано сравнение времени выполнения модуля матрично-векторного произведения на одном ядре CPU (MVP on the fly), на 8 ядрах CPU (parallel MVP on the fly), на GPU (parallel GPU MVP on the fly) и встроенной функции умножения матрицы на вектор Matlab (Matlab MVP).

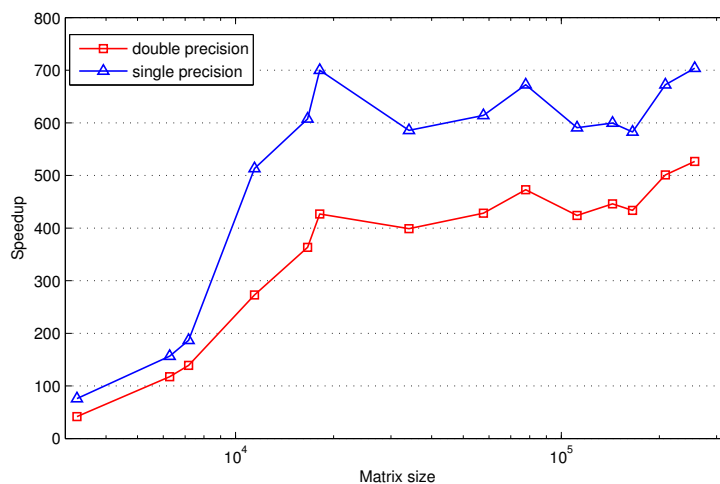


Рис. 9. Ускорение расчетов в зависимости от размера матрицы

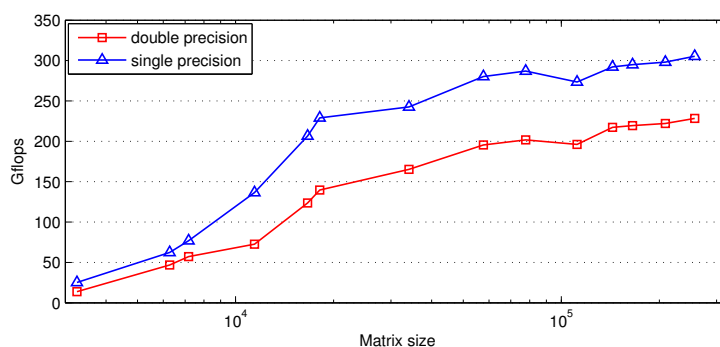


Рис. 10. Производительность в зависимости от размера матрицы

Все расчеты проводились на вычислительной системе с CPU Intel Xeon 5660, 2.8GHz, GPU NVIDIA Tesla C2050. При проведении вычислительных экспериментов было установлено, что для различных размеров задачи наилучшие результаты по времени достигаются при размере блока равным 256 потоков.

На рис. 9 приведено ускорение расчета на GPU по сравнению с CPU для операций с двойной и одинарной точностью. При расчетах на графической карте NVIDIA Tesla C2050 для количества узлов сетки N от 1 000 до 100 000 для уравнений Стокса получено ускорение до 520 раз для операций с двойной точностью и до 700 раз для операций с одинарной точностью.

При проведении тестовых расчетов достигнута следующая производительность: до 220 Gflops для операций с двойной точностью и 300 Gflops для операций с одинарной точностью (рис. 10). Учитывая, что пиковая производительность графической карты Tesla C2050 для чисел с плавающей точкой двойной точности составляет 515 Gflops, одинарной точности — 1,03 Tflops, получены хорошие результаты.

Результаты тестов на графической карте NVIDIA Tesla C2050 показали возможность решения граничных задач для уравнений Стокса размером до 100 000 элементов на одной рабочей станции.

5. Заключение

В среде Matlab разработаны программные продукты для исследования динамики одиночной капли вязкой жидкости в неограниченном потоке другой жидкости, течения Стокса в канале переменного сечения в нескольких модификациях и периодического течения Стокса в канале переменного сечения в трехмерном случае методом граничных элементов. При численном решении были использованы вспомогательные методы установления параболоида и метод контурных интегралов для вычисления средней кривизны области. Смоделирована качественная триангуляция канала произвольного переменного сечения для метода вершинных коллокаций и экспериментального канала для метода коллокаций в центрах граней. Сравнение результатов решения ряда тестовых задач с аналитическими решениями показало высокую эффективность выбранных методов и разработанных алгоритмов.

Для ускорения расчетов разработан модуль матрично-векторного произведения «на лету», то есть без хранения матрицы в памяти вычислительной системы, который используется в GMRES, и распараллелен на графических процессорах (GPU). Представлены результаты по эффективности использования GPU.

Решенные задачи являются первым и главным шагом для дальнейшего моделирования поведения водонефтяных эмульсий в микроканалах.

Литература

1. Boger D.V. Viscoelastic flows through contractions // J. Fluid Mech. 1987. Vol. 19. P. 157–182
2. Lubansky A.S., Boger D.V., Servais C. Burbidge A.S. Cooper-White J.J. An approximate solution to flow through a contraction for high Trouton ratio fluids// Non-Newtonian Fluid Mech. 2007. Vol. 144. P. 87–97
3. NVIDIA Corporation. NVIDIA CUDA Compute Unified Device Architecture Programming Guide. Version 3.2.2010.
4. Pozrikidis C. Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow. 1992(Cambridge University Press, Cambridge, MA).
5. Pozrikidis C. Creeping flow in two—dimensional channels// J. Fluid Mech. Vol. 180. 1987. P. 495–514.
6. Rallison J.M., Acrivos A. A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in an extensional flow // J. Fluid Mech. Vol. 89. part 1, 1978. P. 191–200.
7. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear System. 2000, SIAM.
8. Zinchenko A.Z. and Davis R.H. An efficient algorithm for hydrodynamical interaction of many deformable drops // J. Comp. Phys. vol. 157, 2000. 539-587 p.
9. Ахметов А. Т., Саметов С. П. Особенности течения дисперсии из микрокапель воды в микроканалах// Письма в ЖТФ. Том 36, вып. 22, 2010. С. 21–28.
10. Бреббия К. Методы граничных элементов. Пер. с англ. М.: Мир, 1987. С. 524.
11. Хашпель Дж., Бреннер Г. Гидродинамика при малых числах Рейнольдса. Пер. с англ. М.: Мир, 1976. С. 623.