

# Ускорение расчетов при решении больших задач методом граничных элементов для уравнений Стокса на графических процессорах

Солнышкина О. А.

Институт механики УНЦ РАН, Уфа Центр «Микро- и наномасштабная динамика дисперсных систем»,

БашГУ, Уфа

Аннотация. Исследуется медленное течение вязкой жидкости в канале в трехмерной постановке. Движение жидкости описывается уравнениями Стокса. Задача решалась численно методом граничных элементов. Проведено сравнение полученных результатов с аналитическим решением. Для ускорения расчетов при решении задач большего размера написан модуль матрично-векторного произведения и распараллелен на графических процессорах. В работе представлены результаты по эффективности использования GPU для рассматриваемых задач.

## 1. Введение

Детальное исследование динамики дисперсных систем является актуальной проблемой современной науки и техники. Так, например, эмульсии широко используются в нефтяной промышленности. 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 запирания водонефтяных эмульсий в микроканалах, который заключается в том, что течение эмульсий со временем прекращается, несмотря на постоянно действующий перепад давления. Этот эффект носит как положительные, так и отрицательные черты, которые влияют на величину дебита скважин, но его механизм до сих пор не изучен. Рассматриваемая в данной работе задача является одним из этапов численного исследования этого эффекта.

## 2. Математическая модель и численная методика

Рассмотрим течение некоторого объема V вязкой несжимаемой жидкости с вязкостью  $\mu$  в цилиндрическом канале с гладкой поверхностью S. Предположим, что движение жидкости описывается уравнениями Стокса:

$$\frac{1}{\mu}\nabla p = \nabla^2 \mathbf{u}, \qquad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \tag{1}$$

Пусть поверхность канала разбивается на два подмножества:  $S = S^{(s)} \cup S^{(r)}$ , где  $S^{(r)}$  — жесткая граница (боковая поверхность канала), на которой скорость полагается равной нулю, и  $S^{(s)}$  мягкая граница (входное и выходное сечение канала), на которой скорость отлична от нуля. На мягкой границе зададим условия, соответствующие аналитическому решению течения жидкости в цилиндрическом канале (течение Пуазейля). Граничные условия в этом случае запишем в следующем виде:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}), \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \sigma(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}), \ \mathbf{x} \in S^{(s)},$$
$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0, \ \mathbf{x} \in S^{(r)}.$$
(2)

Задача решалась численно методом граничных элементов [1], основная идея которого заключается в переходе от исходных дифференциальных уравнений в частных производных к граничным интегральным уравнениям, включающим в себя значения искомой функции только на границе области, что снижает размерность задачи на единицу.

Решив полученные уравнения, находим граничные значения. Далее можно вычислить значения неизвестной функции в произвольной точке области, используя полученное решение на границе. Для уравнений Стокса (1) граничные интегральные уравнения имеют вид [1, 2]:

$$\mathbf{u}(\mathbf{y}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + \\ + \int_{S} [\mathbf{T}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})] \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \in V, \\ \frac{1}{2} \mathbf{u}(\mathbf{y}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + \\ + \int_{S} [\mathbf{T}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})] \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \in S.$$
(3)

С учетом граничных условий:

$$\mathbf{u}(\mathbf{y}) = \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + + \int_{S^{(s)}} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \in V, \frac{1}{\mu} \int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{u}_{\mathbf{a}}(\mathbf{y}) - - \int_{S^{(s)}} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{y} \in S.$$
(4)

где  ${\bf G}-$ фундаментальное решение уравнения Стокса;  ${\bf T}-$ тензор напряжений:

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

Граница канала S разбивается на N узлов  $\mathbf{x_i}$ , по которым строим квадратурные формулы граничных интегралов:

$$\int_{S} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{N} \mathbf{I}_{i}^{G}(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_{i}),$$

$$\int_{S} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{N} \mathbf{I}_{i}^{K}(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}_{i}),$$

$$\mathbf{I}_{i}^{G}(\mathbf{y}) = \int_{S_{i}} \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad \mathbf{I}_{i}^{K}(\mathbf{y}) = \int_{S_{i}} \mathbf{K}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) dS(\mathbf{x}).$$
(6)

Используя метод коллокаций в центрах элементов дискретизации, последнее уравнение в граничных интегралах (4) в точках  $\mathbf{y} = \mathbf{x}_{i}$  можно записать следующим образом:

$$\frac{1}{\mu} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{I}_{ji}^{G} \cdot \mathbf{f_{i}} = \frac{1}{2} \mathbf{u_{a}} - \sum_{i=1}^{N} \mathbf{I}_{ji}^{K} \cdot \mathbf{u_{a}}, \ j = 1, ..., N$$

$$\frac{1}{\mu} \mathbf{G} \cdot \mathbf{f} = \frac{1}{2} \mathbf{u_{a}} - \mathbf{K} \cdot \mathbf{u_{a}}.$$
(7)

Сингулярные интегралы рассчитывались с помощью известных тождеств для тестовых решений. Таким образом, получаем систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), решая которую находим компоненты нормального напряжения на границе области.

### 3. Результаты моделирования

В среде Matlab разработан программный продукт, моделирующий течение вязкой жидкости в цилиндрическом канале. Полученные численно результаты сравнивались с аналитическим решением течения в направлении оси Ox.

Сравнение численного решения с аналитическим проводилось в несколько этапов:

1. Компоненты нормального напряжения на жесткой границе области, полученные численно (BEM), сравнивались с аналитическими значениями (Analyt). В результате, относительная погрешность составила 0,7%. На рис. 1 представлены значения нормального напряжения на боковой поверхности цилиндра.

2. Компоненты скорости внутри канала, найденные из первого уравнения (4), используя для вычисления правой части численные значения  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  и точные значения  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ , сравниваются с аналитическими решениями.



Рис. 1. Компоненты скорости  $v_x$  и  $v_z$  внутри канала и линии тока

3. Компоненты скорости внутри канала, найденные из первого уравнения (4), используя для вычисления правой части точные значения  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ , сравниваются с аналитическими решениями.

На рис. 1 показаны результаты, полученные на 2-ом (BEM boundary) и 3-ем (Analyt boundary) этапах сравнения с аналитическим решением (Analytical). Результаты сравнения показывают хорошее приближение численных расчетов к аналитическим с некоторой погрешностью порядка 0.8–1.2%. Но с увеличением узлов дискретизации погрешность численного метода уменышается. Данные результаты получены для модификация программы, которая даёт возможность просчитать течение для N < 10000.

#### 4. Ускорение расчетов на GPU

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 (7) 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 [3].

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 мы подробнее остановимся на первом пункте. Для решения проблем, связанных с использованием памяти, в среде Matlab был разработан программный модуль умножения матрицы на вектор без хранения матрицы в памяти, который используется в GMRES при решении СЛАУ (7). Матрицы вычислялись по следующим формулам:



Рис. 2. Время вычисления матрично-векторного произведения

$$G_{mn}^{ij} = S_n \mathbf{G}(\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_n) =$$

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

$$K_{mn}^{ij} = S_n \mathbf{K}(\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_n) =$$

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

$$m, n = 1, \overline{N}, \ i, j, k = 1, 2, 3,$$
(8)

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

Для ускорения расчетов модуль был распараллелен на центральном многоядерном процессоре (CPU) средствами Matlab Parallel Computing Toolbox. На рис. 2 показано сравнение времени выполнения модуля матрично-векторного произведения на одном ядре CPU (fly MV product), на 8 ядрах CPU (parallel fly MV product) и встроенной функции умножения матрицы на вектор Matlab (Matlab MV product).

Применение модуля матрично-векторного произведения позволяет решить проблему ограничения по памяти вычислительной системы, но время исполнения необходимо уменьшить. Для



Рис. 3. Ускорение расчетов в зависимости от размера матрицы



Рис. 4. Производительность в зависимости от размера матрицы

этих целей модуль был распараллелен с помощью технологии CUDA на графических процессорах (GPU) [4].

На рис. 3 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. 4). 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.

Все расчеты проводились на вычислительной системе с CPU Intel Xeon 5660, 2.8GHz, GPU NVIDIA Tesla C2050. 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.

## Список литературы

- Pozrikidis C. Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow. 1992(Cambridge University Press, Cambridge, MA).
- [2] Бреббия К. Методы граничных элементов. Пер. с анг. М.: Мир, 1987. 524 с.
- [3] Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear System. 2000, SIAM.
- [4] NVIDIA Corporation. NVIDIA CUDA Compute Unified Device Architecture Programming Guide. Version 3.2.2010.