

УДК 519.63

Реализация параллельного алгоритма на основе технологии CUDA для численного исследования дозвуковых химически активных сред

Сидорова А.В.¹, Шишлонов А.А.¹

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет¹

Аннотация: Работа посвящена разработке параллельного вычислительного алгоритма на основе технологии CUDA для численного исследования трёхмерных дозвуковых течений многокомпонентной вязкой теплопроводящей газовой смеси в цилиндрическом канале с учётом многокомпонентной диффузии. За основу взяты математическая модель и последовательный численный алгоритм, ранее разработанные для исследования подобных течений. Приведено описание реализации ключевых этапов алгоритма средствами CUDA: организации памяти, вычислительных ядер, параллельного вычисления потоков и параллельной редукции. Проведено сравнение времени счёта последовательной, MPI-реализации и CUDA-реализации на сетках различной размерности, показавшее ускорение CUDA-версии до 46 раз относительно последовательной программы.

Ключевые слова: математическое моделирование, дозвуковые течения, многокомпонентная среда, уравнения Навье–Стокса, технология CUDA, параллельные вычисления.

1. Введение

Численное моделирование дозвуковых течений многокомпонентных смесей широко применяется при проектировании трубчатых реакторов, теплообменников и других технологических устройств. Математические модели подобных процессов основаны на системе уравнений Навье–Стокса с учётом вязкости, теплопроводности и многокомпонентной диффузии, что приводит к высокой вычислительной сложности задачи. Последовательная реализация численных алгоритмов на CPU требует значительных расчётных времён даже для сеток умеренного размера, а использование технологии MPI, хотя и позволяет ускорить вычисления, не всегда обеспечивает время счёта, приемлемое для проведения серийных расчётов. В связи с этим актуальной является разработка параллельного алгоритма с использованием графических процессоров на основе технологии CUDA, обладающей принципиально иным уровнем производительности для задач с регулярной структурой данных.

Целью работы является разработка параллельного вычислительного алгоритма на основе технологии CUDA для численного исследования дозвуковых многокомпонентных вязких газовых потоков с учётом многокомпонентной диффузии, вязкости и теплопроводности в трёхмерной цилиндрической постановке.

2. Математическая модель и численный алгоритм

За основу настоящей работы взяты математическая модель и последовательный вычислительный алгоритм, разработанные и реализованные в работах [1–3]

для исследования дозвуковых вязких многокомпонентных газовых течений. Модель описывает трёхмерное течение вязкой теплопроводящей газовой смеси в приближении малых чисел Маха в цилиндрической системе координат (z, r, φ) и представляет собой систему уравнений Навье–Стокса, записанную относительно массовых долей компонент, компонент импульса и энтальпии смеси, с учётом конвективных и диффузионно-вязкостных потоков, а также источников членов, обусловленных цилиндрической геометрией. Диффузионный перенос компонент и перенос тепла рассчитываются с использованием средних по смеси коэффициентов диффузии и теплопроводности, зависящих от температуры и состава смеси.

Численное решение строится по схеме расщепления по физическим процессам с использованием явной конечно-разностной схемы. На каждом временном шаге последовательно выполняются: задание граничных условий; вычисление конвективных потоков (по схеме Русанова) и диффузионно-вязких потоков (центральными разностями второго порядка); обновление консервативных переменных; коррекция динамической составляющей давления путём решения уравнения Пуассона итерационным методом Якоби; коррекция скоростей и определение температуры итерационным методом Ньютона.

3. Реализация параллельного алгоритма средствами CUDA

Разработанный параллельный алгоритм реализует описанную выше вычислительную схему средствами технологии CUDA. Расчётная область покрывается равномерной сеткой размерностью $320 \times 16 \times 10$ ячеек, при этом каждая ячейка обрабатывается отдельным потоком GPU, что соответствует структуре конечно-разностных схем на регулярных сетках.

Основные этапы реализации включают: выделение и обнуление буферов видеопамяти под все газодинамические поля и потоковые массивы на этапе инициализации, что исключает повторные затраты на выделение памяти на каждом временном шаге; разработку макросов линейного индексирования трёхмерных и четырёхмерных массивов; реализацию граничных условий в виде отдельных последовательно вызываемых ядер; параллельное вычисление конвективных, диффузионных и вязких потоков через грани ячеек по трём направлениям (X, Y, Z) с использованием отдельных потоков (streams) CUDA, позволяющее выполнять вычисления по разным направлениям асинхронно на GPU; обновление консервативных переменных и температуры на новом временном слое; параллельную редукцию для определения максимальной невязки давления, используемой в качестве критерия сходимости итерационного метода Якоби.

При проектировании алгоритма учитывались особенности архитектуры GPU: обеспечение объединённого доступа к глобальной памяти соседними потоками одного варпа, минимизация ветвлений внутри варпа и использование разделяемой памяти в операциях редукции.

4. Результаты расчётов

Верификация параллельной реализации проведена путём сопоставления результатов расчёта течения чистого этана в цилиндрическом канале длиной 0.32 м и радиусом 0.01 м при начальной температуре 1073 К и атмосферном давлении, полученных с использованием последовательной программы и параллельной CUDA-реализации. Поля плотности, давления и температуры полностью совпали для обеих реализаций

и для сеток различной размерности, что подтверждает корректность параллельного алгоритма.

Сравнение времени счёта последовательной, MPI-реализации и CUDA-реализации на процессоре Intel Core i7-9700K и видеокарте NVIDIA RTX 2070 Super приведено в таблице 1.

Таблица 1. Сравнение времени счёта различных реализаций

Размерность сетки (количество ячеек)	CUDA, с	MPI (10 процес- сов), с	Последовательный алгоритм, с
6400	0.17	0.37	3.07
51200	0.51	2.50	23.66

На сетке 6 400 ячеек ускорение CUDA-реализации относительно последовательной составило 18.3 раза, MPI-реализации — 8.3 раза. На сетке 51 200 ячеек ускорение достигло 46.2 и 9.5 раза соответственно, а сравнение CUDA с MPI на 10 процессах на крупной сетке дало ускорение около 4.9 раза. Таким образом, с увеличением размера расчётной сетки эффективность CUDA-реализации возрастает существенно, чем эффективность MPI-реализации, что объясняется большим числом одновременно работающих вычислительных ядер GPU и их более полной загрузкой при увеличении объёма данных.

Литература

1. Peskova E. E., Snytnikov V. N., Zhalnin R. V. The computational algorithm for studying internal laminar flows of a multicomponent gas with different-scale chemical processes // Computer Research and Modeling. 2023. № 15(5). P. 1169–1187.
2. Peskova E. E., Yazovtseva O. S., Makarova E. Yu., Tingaeva N. A. Parallel implementation of a computational algorithm based on the explicit iterative scheme for modeling subsonic reacting gas flows // Communications in Computer and Information Science. 2023. P. 112–121.
3. Мустайкин М. С., Пескова Е. Е. Параллельный алгоритм для численного исследования дозвуковых реагирующих течений в цилиндрической системе координат // Параллельные вычислительные технологии: труды XIX Международной научной конференции. 2025. С. 212–215.

MSC 65Y05

Implementation of a parallel algorithm based on CUDA technology for the numerical study of subsonic chemically active media

A.V. Sidorova¹, A.A. Shishlonov¹

National Research Mordovia State University¹

Abstract: The paper is devoted to the development of a parallel computational algorithm based on CUDA technology for the numerical study of three-dimensional subsonic flows of a multicomponent viscous heat-conducting gas mixture in a cylindrical channel, taking into account multicomponent diffusion. The mathematical model and the sequential numerical algorithm previously developed for the study of such flows are taken as a basis. A description of the implementation of the key stages of the algorithm using CUDA is presented: memory organization, computational kernels, parallel computation of fluxes, and parallel reduction. A comparison of the computation time of the sequential, MPI-based, and CUDA-based implementations on grids of various sizes is performed, showing a speedup of the CUDA version of up to 46 times relative to the sequential program.

Keywords: mathematical modeling, subsonic flows, multicomponent medium, Navier–Stokes equations, CUDA technology, parallel computing.