DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

www.cea.fr

Mini-projet du cours de programmation GPU

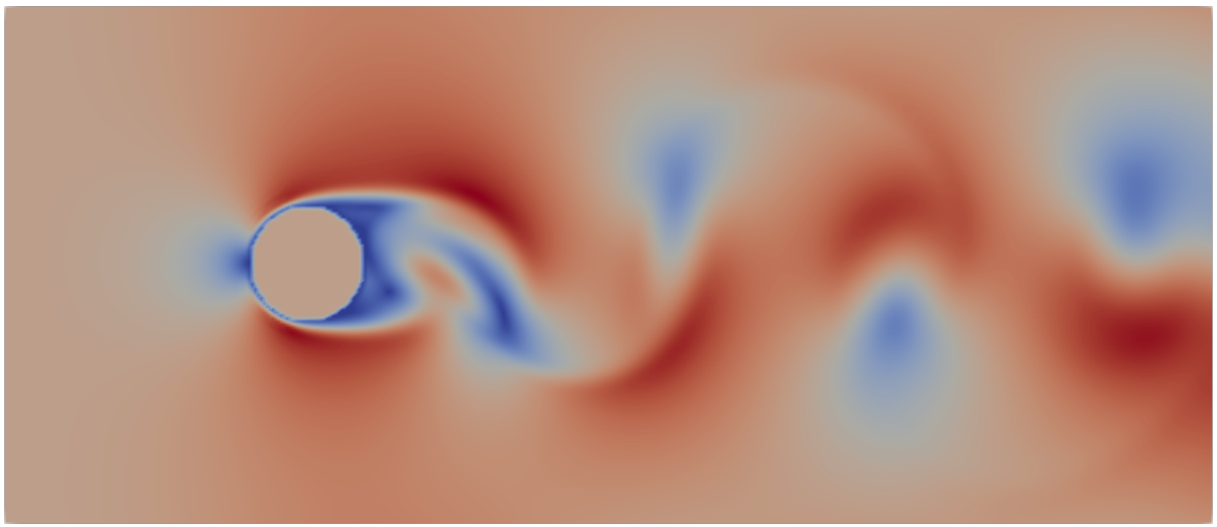
Pierre KESTENER

CEA / DRF / IFRU / DEDIP
Master spécialisé HPC-IA, Mines Paritech, Sophia Antipolis

11 janvier 2021

La méthode dite de Boltzmann sur réseau

- LBM (Lattice Boltzmann Method) : simulation d'écoulement fluide



Théorie cinétique des gaz

- théorie cinétique des gaz
- fonction de distribution $f(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{c}}, t)$, avec $\vec{\mathbf{r}} \in \mathbb{R}^3$ et $\vec{\mathbf{c}} \in \mathbb{R}^3$
- interprétation de $f(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{c}}, t)\,\mathrm{d}\,\vec{\mathbf{r}}\,\mathrm{d}\,\vec{\mathbf{c}}$: nombre de particules dans le volume élémentaire $\mathrm{d}\,\vec{\mathbf{r}}$ et de vitesse comprise entre $\vec{\mathbf{c}}$ et $\vec{\mathbf{c}} + \mathrm{d}\,\vec{\mathbf{c}}$
- les **grandeurs hydrodynamiques macroscopiques usuelles** (densité, vitesse, énergie, ...) sont définies comme les moments de la fonction de distribution :
  - **densité** : $\rho(\vec{\mathbf{r}}, t) = \int f(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{c}}, t)\,\mathrm{d}\,\vec{\mathbf{c}}$
  - **quantité de mouvement** : $\vec{\mathbf{p}}(\vec{\mathbf{r}}, t) = \int f(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{c}}, t)\,\vec{\mathbf{c}}\,\mathrm{d}\,\vec{\mathbf{c}} = \rho\,\vec{\mathbf{v}}$
  - **énergie cinétique** $e_{cin}(\vec{\mathbf{r}}, t) = \int f(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{c}}, t)||\vec{\mathbf{c}}||^2\,\mathrm{d}\,\vec{\mathbf{c}} = \rho\,\vec{\mathbf{v}}$
- si on sait faire évoluer dans le temps f, alors on peut connaitre la dynamique du mouvement du fluide $\Rightarrow$ équation de boltzmann

L'équation de Boltzmann

équation de Boltzmann est une équation de transport qui décrit comment évolue dans le temps la distribution des particules

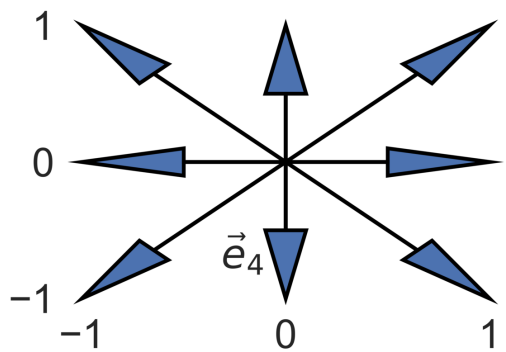
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \overrightarrow{\mathbf{c}} \cdot \nabla_{\overrightarrow{\mathbf{r}}} f + \overrightarrow{\mathbf{F}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \overrightarrow{\mathbf{c}}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$$

La méthode dite de Boltzmann sur réseau

- **Problème :** pour simuler numériquement, il faut discrétiser $f(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{c}}, t)$ sachant que $\vec{\mathbf{r}} \in \mathbb{R}^3$ et $\vec{\mathbf{c}} \in \mathbb{R}^3 \Rightarrow$ le nombre de variables est rapidement gigantesque ($\sim N^6$)
  exemple : $N = 100 \Rightarrow N^6 = 10^{12}$ soit 8 TBytes de mémoire vive juste pour stocker f à un pas de temps, c'est impraticable en pratique.
- **Solution :** on discrétise l'espace (variable $\vec{\mathbf{r}}$ sur une grille N^3 et la vitesse $\vec{\mathbf{c}}$ sur un petit nombre (quelque unités à quels dizaines) ; cela s'appelle la méthode dite de Boltzmann sur réseau qui donne des simulations numériques en bon accord avec les observations expérimentales.
  avantages principaux des méthodes LBM : facile à mettre en œuvre numériquement et facile à paralléliser.

De manière simplifiée, on peut dire que l'évolution temporelle de la fonction de distribution (où plus exactement des q composantes de f) est calculée en itérant les deux opérations suivantes :

- collision : $f_i(\vec{x}, t+\delta_t) = f_i(\vec{x}, t) + \frac{f_i^{eq}(\vec{x},t) - f_i(\vec{x},t)}{\tau_f}$, avec $0 \leq i < q$
  le terme de collision choisi ici modélise un retour (relaxation) vers la distribution d'équilibre
- stream : $f_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t+1) = f_i(\vec{x}, t)$
  les particules modélisées par f_i se déplacent dans la direction e_i



Mini-projet

Objectif : En se basant soit sur la version python, soit sur la version C++, et en utilisant le cours de programmation des GPUs, proposer une version parallèlisée de la méthode LBM.

- Choisir le modèle de programmation adapté pour la parallélisation :
  - numba pour python
  - OpenACC pour C++
  - CUDA/C++ pour les plus courageux ;)
- Fournir un mini rapport détaillant votre démarche (identification des noyaux de calcul) et une étude de performance : on pourra par exemple présenté une courbe de speedup (rapport du temps de calcul de la version séquentielle fournie sur le temps de calcul de la version parallèle).