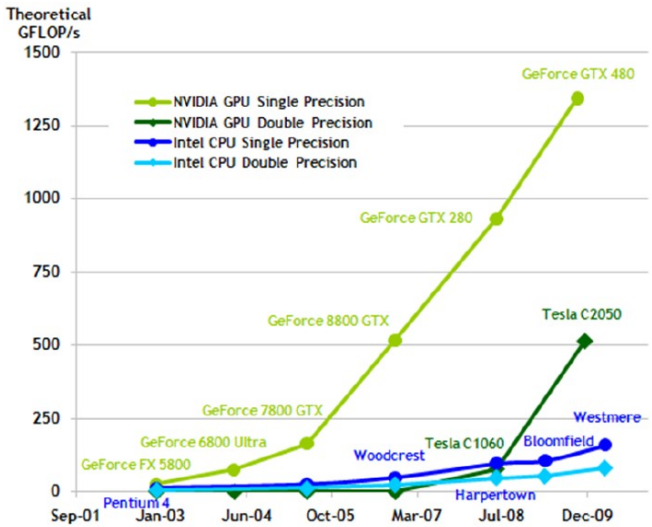
Lösung der zweidimensionalen Wirbeltransportgleichung auf NVIDIA Grafikkarten

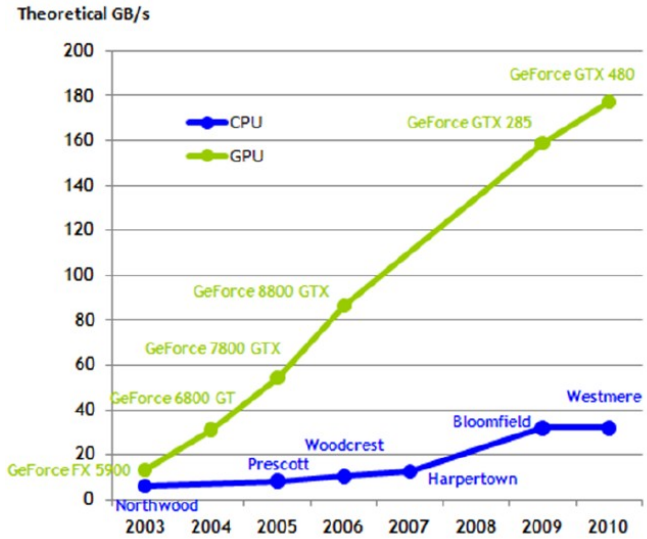
Manuel Baumann, Pavel Buran

21. Dezember 2010

Gliederung

- Die Rechenleistung von Grafikkarten (GPUs) hat in den letzten zehn Jahren stark zugenommen:





- Die Programmierumgebung CUDA ermöglicht parallele Programmierung auf NVIDIA Grafikkarten.
- CUDA-Funktionen können direkt aus einem *C/C++* Code gestartet werden.

Die Navier-Stokes-Gleichung (NSG)

Für inkompressible Newton-Fluide wird das Strömungsverhalten durch die NSG beschrieben:

$$\frac{\partial \vec{c}}{\partial t} + \vec{c} \cdot \mathit{grad}\, \vec{c} = \vec{f} - \frac{1}{\rho} \mathit{grad}\, p + \nu \Delta \vec{c}$$

Hierbei bezeichnet:

- $\vec{c} = [u, v, w]^T \in \mathbb{R}^{2,3}$ die Geschwindigkeit des Fluids,
- $p \in \mathbb{R}$ den Druck,
- $\rho \in \mathbb{R}$ die Dichte und $\nu \in \mathbb{R}$ die kinemat. Viskosität des Fluids,
- $\vec{f} \in \mathbb{R}^{2,3}$ die Summe der konservativen Kräfte.

Die NSG kann für inkompressible, ebene Strömungen in die so genannten **Wirbeltransportgleichung** überführt werden.

Wirbelstärke ω

Definition

Die **Wirbelstärke** $\vec{\omega}$ einer Strömung ist definiert als Rotation der Geschwindigkeit $\vec{c}$:

$$\vec{\omega} := rot\,(\vec{c})$$

Unter der Annahme einer ebenen Strömung ergibt sich die Wirbelstärke zu einer skalarwertigen Größe:

$$rot\ \vec{c} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u(x_1, x_2, \not{t}) \\ v(x_1, x_2, \not{t}) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\partial v}{\partial x_1} - \frac{\partial u}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega(x_1, x_2, t) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \omega = \frac{\partial v}{\partial x_1} - \frac{\partial u}{\partial x_2}$$

Stromfunktion Ψ

Betrachtet man ebene Strömungen für inkompressible Fluide, so vereinfacht sich die **Kontinuitätsgleichung**:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div\,(\rho \vec{c}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial u}{\partial x_1} + \frac{\partial v}{\partial x_2} = 0$$

Definition

Auf Grund der folgenden Definition für die **Stromfunktion** $\Psi(x_1, x_2)$ wird die Kontinuitätsgleichung implizit erfüllt:

$$u := \frac{\partial \Psi}{\partial x_2} \qquad v := -\frac{\partial \Psi}{\partial x_1}$$

Setze die Definition der Stromfunktion $(*)$ in die Gleichung für die Wirbelstärke ein:

$$\omega = \frac{\partial v}{\partial x_1} - \frac{\partial u}{\partial x_2} \overset{(*)}{=} -\frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x_1}\right) - \frac{\partial}{\partial x_2}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x_2}\right) = -\Delta\Psi \qquad (1)$$

Diese Gleichung $-\Delta\Psi = \omega$ wird als **Poissongleichung** bezeichnet und stellt den ersten Teil des Differentialgleichungssystems dar.

Betrachte nun die NSG komponentenweise:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial u}{\partial x_1} + v \cdot \frac{\partial u}{\partial x_2} = -\frac{\partial}{\partial x_1}(U + \frac{p}{\rho}) + \nu(\underbrace{\frac{\partial^2 u}{\partial {x_1}^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial {x_2}^2}}_{=\Delta u}) \quad \text{(I)}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial v}{\partial x_1} + v \cdot \frac{\partial v}{\partial x_2} = -\frac{\partial}{\partial x_2}(U + \frac{p}{\rho}) + \nu(\underbrace{\frac{\partial^2 v}{\partial {x_1}^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial {x_2}^2}}_{=\Delta v}) \quad \text{(II)}$$

Aus $\frac{\partial}{\partial x_1}(II) - \frac{\partial}{\partial x_2}(I)$ folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\underbrace{\frac{\partial v}{\partial x_1} - \frac{\partial u}{\partial x_2}}_{=\omega}) + \underbrace{u \cdot \frac{\partial^2 v}{\partial {x_1}^2} - u \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2}}_{=u \cdot \frac{\partial \omega}{\partial x_1}} + \underbrace{v \cdot \frac{\partial^2 v}{\partial x_1 \partial x_2} - v \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial {x_2}^2}}_{=v \cdot \frac{\partial \omega}{\partial x_2}}$$

$$+ \underbrace{\frac{\partial u}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial v}{\partial x_1} + \frac{\partial v}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial v}{\partial x_2} - \frac{\partial u}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial u}{\partial x_1} - \frac{\partial v}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial u}{\partial x_2}}_{=0 \text{ (folgt aus der Definition von } \Psi)}$$

$$= \underbrace{-\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}(U + \frac{p}{\rho}) + \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_1}(U + \frac{p}{\rho})}_{=0 \text{ (Satz von Schwarz)}} + \underbrace{\nu(\frac{\partial}{\partial x_1}\Delta v - \frac{\partial}{\partial x_2}\Delta u)}_{=\nu\Delta\omega \text{ (Linearität)}}$$

Man erhält somit die **Wirbeltransportgleichung**:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \vec{c}\, grad\, \omega = \nu \Delta \omega \tag{2a}$$

Die Boussinesq-Annahme

Die bisher als konstant angenommene Dichte ρ_0 wird um einen temperaturabhängigen Term $\delta\rho$ erweitert, so dass $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ gilt.

Die **Boussinesq-Approximation** besagt, dass für Trägheits- und Reibungskräfte weiterhin angenommen werden kann, dass der temperaturinduzierte Dichteunterschied vernachlässigbar ist:

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho \approx \rho_0 \quad \Leftrightarrow \quad \delta\rho \ll 1$$

Somit erweitert sich die Wirbeltransportgleichung zu:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \vec{c}\, grad\, \omega = \nu \Delta \omega + \underbrace{\beta g}_{=:C} \frac{\partial T}{\partial x_1}, \tag{2b}$$

wobei als äußere Kraft $\vec{f} = [0, -g]^T$ angenommen wird.

Die **Wärmeleitungsgleichung für bewegte Fluide** hat die selbe mathematische Struktur wie die Wirbeltransportgleichung:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{c}\, grad\ T = \underbrace{\frac{\lambda}{\rho c_w}}_{=:a} \Delta T \tag{3}$$

Hierbei wurde in der Konstanten a

- die Wärmeleitfähigkeit λ,
- die Dichte ρ des Fluids,
- sowie die Wärmekapazität c_W des Fluids

berücksichtigt.

Zusammenfassung

Es ist folgendes System von partiellen Differentialgleichungen zu lösen:

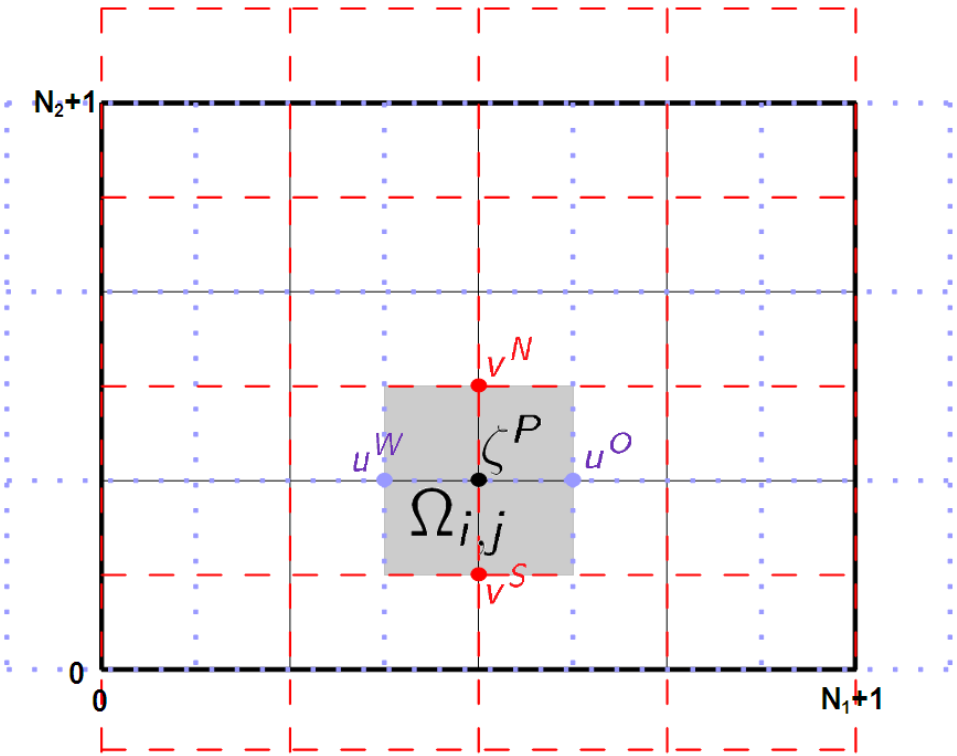
$$-\Delta\Psi = \omega \tag{1}$$

$$\frac{\partial\omega}{\partial t} + \vec{c}\,grad\,\omega = \nu\Delta\omega + C\frac{\partial T}{\partial x_1} \tag{2b}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{c}\,grad\,T = a\Delta T \tag{3}$$

Dieses System wird mit der **Finiten-Volumen-Methode (FVM)** im Ort und einer impliziten Euler-Integration in der Zeit diskretisiert.

Als **Diskretisierungsgebiet** wird ein rechteckiges Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ gewählt, das in drei versetzte Gitter mit Schrittweite h äquidistant diskretisiert wird.



- Hauptgitter mit Mittelwerten für $\zeta = \{\omega, \Psi, T\}$ innerhalb eines Kontrollvolumens
- Gitter 1 mit Geschwindigkeitswerten im Norden und Süden eines Kontrollvolumens (rot)
- Gitter 2 mit Geschwindigkeitswerten im Osten und Westen eines Kontrollvolumens (lila)

Anwenden der FVM auf die Poissongleichung:

$$-\int_{\Omega} \Delta\Psi d\Omega = \int_{\Omega} \omega d\Omega$$

$$\Rightarrow \sum_{i\in I, j\in J} -\int_{\Omega_{i,j}} \Delta\Psi d\Omega_{i,j} = \sum_{i\in I, j\in J} \int_{\Omega_{i,j}} \omega d\Omega_{i,j}$$

Betrachte einzelnes finites Volumen (=Kontrollvolumen):

$$-\int_{\Omega_{i,j}} \Delta\Psi d\Omega_{i,j} = \int_{\Omega_{i,j}} \omega d\Omega_{i,j}$$

$$\Leftrightarrow -\int_{\Omega_{i,j}} div\ grad\ \Psi d\Omega_{i,j} = \int_{\Omega_{i,j}} \omega d\Omega_{i,j}$$

$$\Leftrightarrow -\int_{\partial\Omega_{i,j}} grad\,\Psi \cdot \vec{n}\, d\partial\Omega_{i,j} = \int_{\Omega_{i,j}} \omega\ d\Omega_{i,j}$$

$$\Leftrightarrow -\int_{\partial\Omega_{i,j}} \frac{\partial\Psi}{\partial\vec{n}}\ d\partial\Omega_{i,j} = \int_{\Omega_{i,j}} \omega\ d\Omega_{i,j},$$

wobei $\partial\Omega_{i,j} = \Gamma_{i,j} = \Gamma^N_{i,j} \cup \Gamma^O_{i,j} \cup \Gamma^S_{i,j} \cup \Gamma^W_{i,j}$ für rechteckige Kontrollvolumen.

$$
\begin{aligned}
-\int_{\Gamma_{i,j}} \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{n}}\, d\Gamma_{i,j} &= -\int_{\Gamma_N} \frac{\partial \Psi}{\partial x_2}\, dx_1 - \int_{\Gamma_O} \frac{\partial \Psi}{\partial x_1}\, dx_2 + \int_{\Gamma_S} \frac{\partial \Psi}{\partial x_2}\, dx_1 + \int_{\Gamma_W} \frac{\partial \Psi}{\partial x_1}\, dx_2 \\
&\approx -\frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j}}{h} h - \frac{\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i,j}}{h} h + \frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i,j-1}}{h} h + \frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i-1,j}}{h} h \\
&= -\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i+1,j} + 4\Psi_{i,j} - \Psi_{i,j-1} - \Psi_{i-1,j}
\end{aligned}
$$

$$\int_{\Omega_{i,j}} \omega \, d\Omega_{i,j} \approx h^2 \omega_{i,j}$$

Dies kann bei lexikographischer Anordnung in ein LGS geschrieben werden: $A_h \Psi_h = \omega_h + b_h^{\Psi}$, mit Systemmatrix

$$
A_h := h^{-2} \begin{bmatrix} T_A & -E_{N_1} & & \\ -E_{N_1} & T_A & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -E_{N_1} \\ & & -E_{N_1} & T_A \end{bmatrix}, \quad T_A := \begin{bmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & 4 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 4 \end{bmatrix}
$$

und Randwertevektor

$$b_h^{\Psi} = h^{-2}[\Psi_{0,1} + \Psi_{1,0}, \Psi_{2,0}, ..., \Psi_{N_1-1,0}, \Psi_{N_1,0} + \Psi_{N_1+1,1}, \Psi_{0,2}, ..., \Psi_{N_1+1,2}, ...]^T$$

Wirbeltransportgleichung und Wärmeleitungsgleichung lassen sich verallgemeinert schreiben als:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = k_1 \Delta \zeta - \vec{c}\, grad\, \zeta + k_2 \frac{\partial T}{\partial x_1},$$

mit $\zeta := \{\omega, T\}$, $k_1 := \begin{cases} \nu & \text{für } \zeta = \omega \\ a & \text{für } \zeta = T \end{cases}$ sowie $k_2 := \begin{cases} C & \text{für } \zeta = \omega \\ 0 & \text{für } \zeta = T \end{cases}$.

Anwenden der FVM ergibt:

$$\sum_{i \in I, j \in J} \int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial \zeta}{\partial t} d\Omega_{i,j} = \sum_{i \in I, j \in J} \left(\underbrace{k_1 \int_{\Omega_{i,j}} \Delta \zeta d\Omega_{i,j}}_{\text{Laplace-Term}} - \overbrace{\int_{\Omega_{i,j}} \vec{c}\, grad\, \zeta d\Omega_{i,j}}^{\text{Konvektionsterm}} + \underbrace{k_2 \int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial T}{\partial x_1} d\Omega_{i,j}}_{\text{Temperatur-Term}} \right)$$

$$\approx B_h \zeta_h - C_h \zeta_h + D_h T_h + b_h$$

Laplace-Term:

Der Laplace-Term kann analog zur Poissongleichung diskretisiert werden:

$$k_1 \int_{\Omega_{i,j}} \Delta\zeta \, d\Omega_{i,j} = k_1 \int_{\partial\Omega_{i,j}} grad \cdot \zeta \, \vec{n} \, d\partial\Omega_{i,j} \approx k_1(\zeta^N + \zeta^O - 4\zeta^P + \zeta^S + \zeta^W),$$

so dass sich für die Matrix $B_h := -k_1 h^2 A_h$ ergibt.

Temperatur-Term:

Für den Temperatur-Term muss eine erste Ableitung diskretisiert werden. Dies geschieht via:

$$k_2 \int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial T}{\partial x_1} d\Omega_{i,j} = k_2 \int_S^N \int_W^O \frac{\partial T}{\partial x_1} dx_1 dx_2 = \frac{k_2}{2} \int_S^N (T^O - T^W) dx_2 \approx \frac{k_2 h}{2}(T^O - T^W)$$

und führt in Matrixschreibweise auf:

$$D_h := \frac{k_2 h}{2} \begin{bmatrix} T_D & & & \\ & T_D & & \\ & & \ddots & \\ & & & T_D \end{bmatrix}, \qquad T_D := \begin{bmatrix} 0 & -1 & & \\ 1 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Konvektionsterm:

$$\int_{\Omega_{i,j}} \vec{c}\, grad\, \zeta d\Omega_{i,j} = \int_{\Omega_{i,j}} u\frac{\partial \zeta}{\partial x_1} + v\frac{\partial \zeta}{\partial x_2} d\Omega_{i,j}$$

$$= \int_S^N \int_W^O u\frac{\partial \zeta}{\partial x_1} dx_1 dx_2 + \int_W^O \int_S^N v\frac{\partial \zeta}{\partial x_2} dx_2 dx_1$$

$$\approx \int_S^N \frac{h}{2}\left(u^O \frac{\zeta^O - \zeta^P}{h} + u^W \frac{\zeta^P - \zeta^W}{h}\right) dx_2 + \int_W^O \frac{h}{2}\left(v^N \frac{\zeta^N - \zeta^P}{h} + v^S \frac{\zeta^P - \zeta^S}{h}\right) dx_1$$

$$\approx \frac{h}{2}\left(u^O\zeta^O + (u^W - u^O)\zeta^P - u^W\zeta^W\right) + \frac{h}{2}\left(v^N\zeta^N + (v^S - v^N)\zeta^P - v^S\zeta^S\right)$$

Diese erste Diskretisierung war instabil. Daher wurde unter Einführung von $[\![x, y]\!] := max(x, y)$ ein *Upwind*-Verfahren implementiert:

$$\int_{\Omega_{i,j}} \vec{c}\, grad\, \zeta d\Omega_{i,j} \approx h(-[\![-v^N, 0]\!]\zeta^N - [\![-u^O, 0]\!]\zeta^O + [\![v^S, 0]\!]\zeta^S - [\![u^W, 0]\!]\zeta^W$$
$$- ([\![u^W, 0]\!] + [\![-u^O, 0]\!] + [\![v^S, 0]\!] + [\![-v^N, 0]\!])\zeta^P)$$

Nachdem die Transportgleichung im Ort durch die Matrizen B_h, C_h und D_h diskretisiert wurde, erfolgt die Zeitintegration durch eine **Variation des impliziten Eulerverfahren**:

$$\int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial \zeta}{\partial t} d\Omega_{i,j} \approx h^2 \frac{\zeta_h^{i+1} - \zeta_h^i}{\delta t} = B_h \zeta_h^{i+1} - C_h^i \zeta_h^i + D_h T_h^i + b_h^i,$$

mit Zeitschrittweite δt.

Durch elementare Umformungen führt dies zu einem LGS:

$$\underbrace{(E_n - \frac{\delta t}{h^2} B_h)}_{\textit{Systemmatrix}} \zeta_h^{i+1} = \underbrace{(E_n - \frac{\delta t}{h^2} C_h^i)\zeta_h^i + \frac{\delta t}{h^2} D_h T_h^i + \frac{\delta t}{h^2} b_h^i}_{\textit{Rechte Seite}}$$

Als Richtwert für den Zeitschritt, gilt die Courant-Zahl $Co := \frac{c_{max} \cdot \delta t}{h} < 1$.

Zusammenfassung

Das System aus partiellen Differentialgleichungen liegt nun in vollständig diskretisierter Form vor:

$$A_h \Psi_h = \underbrace{\omega_h + b_h^{\Psi}}_{=:\tilde{\omega}_h}$$

$$\underbrace{(E_n + \delta t \cdot \nu \cdot A_h)}_{=:B_h^{\omega}} \omega_h = \underbrace{(E_n - \frac{\delta t}{h^2} \cdot C_h)\omega_h + \frac{\delta t}{h^2} \cdot D_h T_h + \frac{\delta t}{h^2}\, b_h^{\omega}}_{=:rhs^{\omega}}$$

$$\underbrace{(E_n + \delta t \cdot a \cdot A_h)}_{=:B_h^{T}} T_h = \underbrace{(E_n - \frac{\delta t}{h^2} \cdot C_h)\, T_h + \frac{\delta t}{h^2}\, b_h^{T}}_{=:rhs^{T}}$$

Eindeutig lösbar durch Vorgabe von Anfangswerten und Randbedingungen:

- Randbedingungen für Ψ_h, ω_h, T_h auf $\partial\Omega$
- Anfangswerte T_h^0, w_h^0 im Innern von Ω

In einem physikalischen System sind in der Regel bekannt:

- Randbedingungen für $T_h, \vec{c}_h$ auf $\partial\Omega$
- Anfangswerte für $T_h, \vec{c}_h$ im Innern von Ω

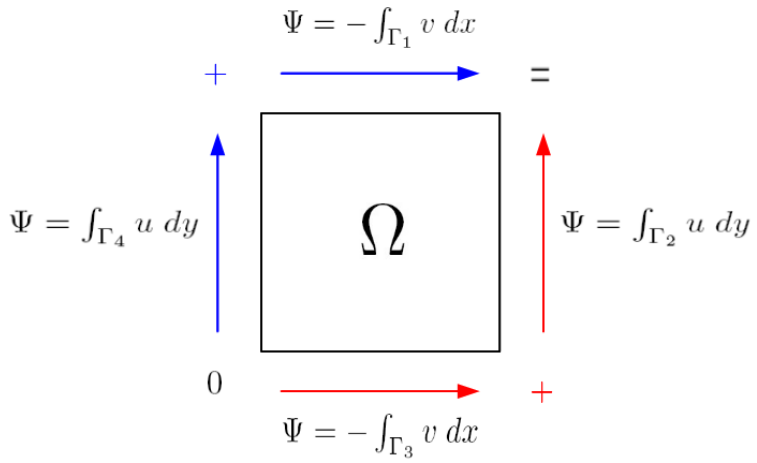
Zum Einbau von Randbedingungen werden diese als explizite Werte benötigt (Dirichlet-Randbedingungen).

Wärmeisolierte Wände werden aber durch Neumann-Randbedingungen modelliert. Diese können aber leicht in Dirichlet-Randbedingungen umgeschrieben werden:

$$\frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \approx \frac{T_{i,1} - T_{i,0}}{h} \stackrel{!}{=} 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad T_{i,0} = T_{i,1} \quad \text{auf } \Gamma_3$$

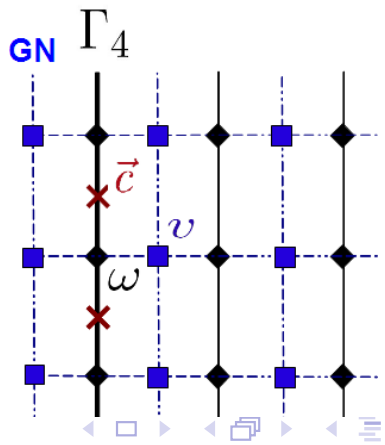
Berechnung von Randwerten für die Stromfunktion Ψ_h durch Integration der Gleichungen:

$$u = \frac{\partial \Psi}{\partial x_2} \qquad v = -\frac{\partial \Psi}{\partial x_1} \qquad \rightarrow$$

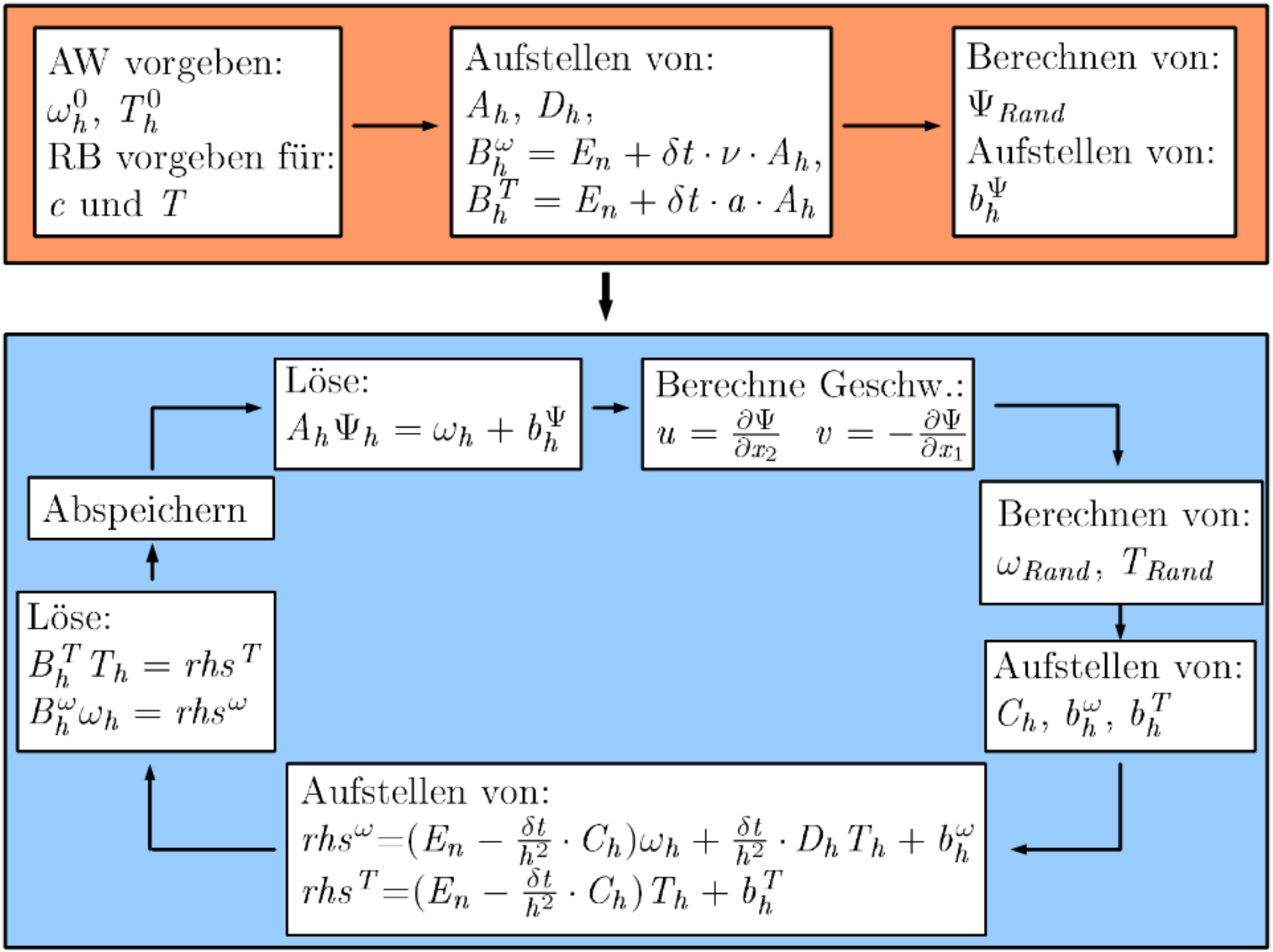


Berechnung von Randwerten für die Wirbelstärke ω_h nach:

$$\omega = \frac{\partial v}{\partial x_1} - \frac{\partial u}{\partial x_2}$$

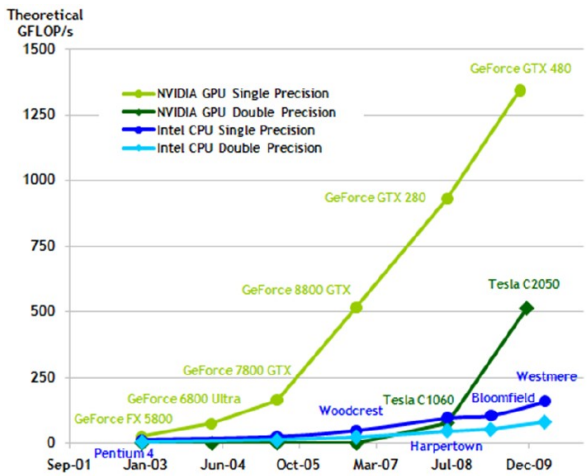


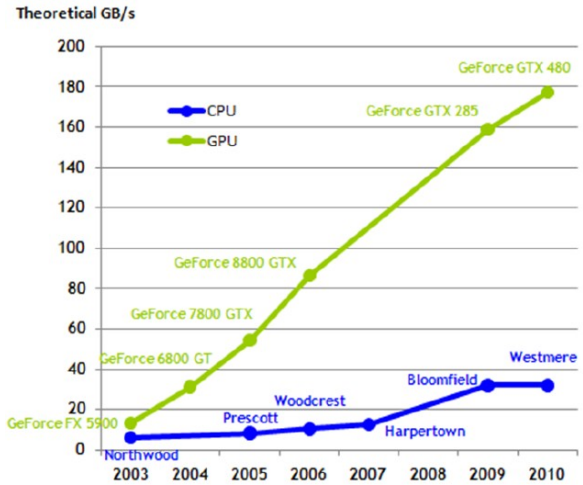
Aufbau des Solvers



Was ist CUDA ?

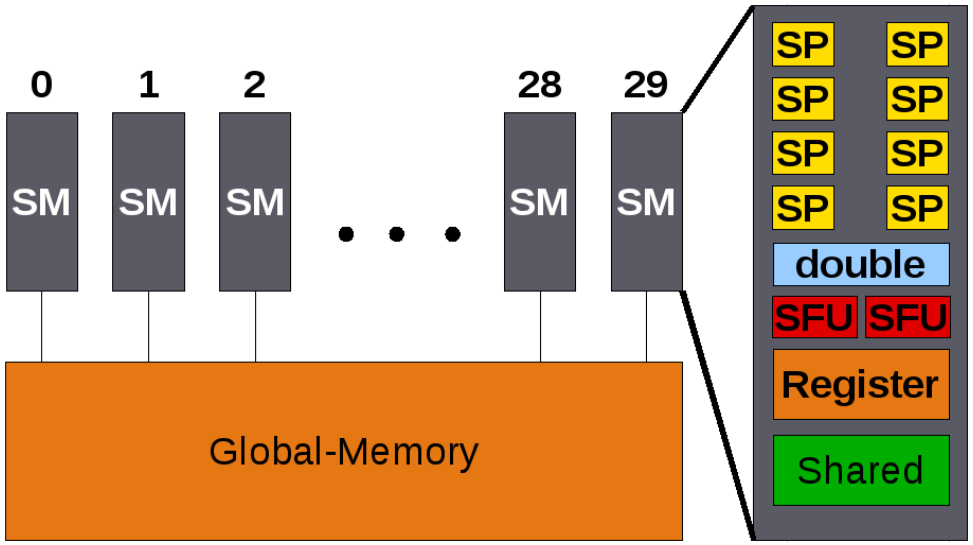
- Die Rechenleistung von GPUs ist deutlich höher als von CPUs, da sie **parallel** arbeiten.
- Besonders interessant fürs wissenschaftliche Rechnen - bisher nur für Grafikberechnungen nutzbar.





- CUDA ist eine 2006 entwickelte Softwareumgebung zur Programmierung von NVIDIA Grafikkarten
- *C/C++* Spracherweiterung

Schematischer Aufbau



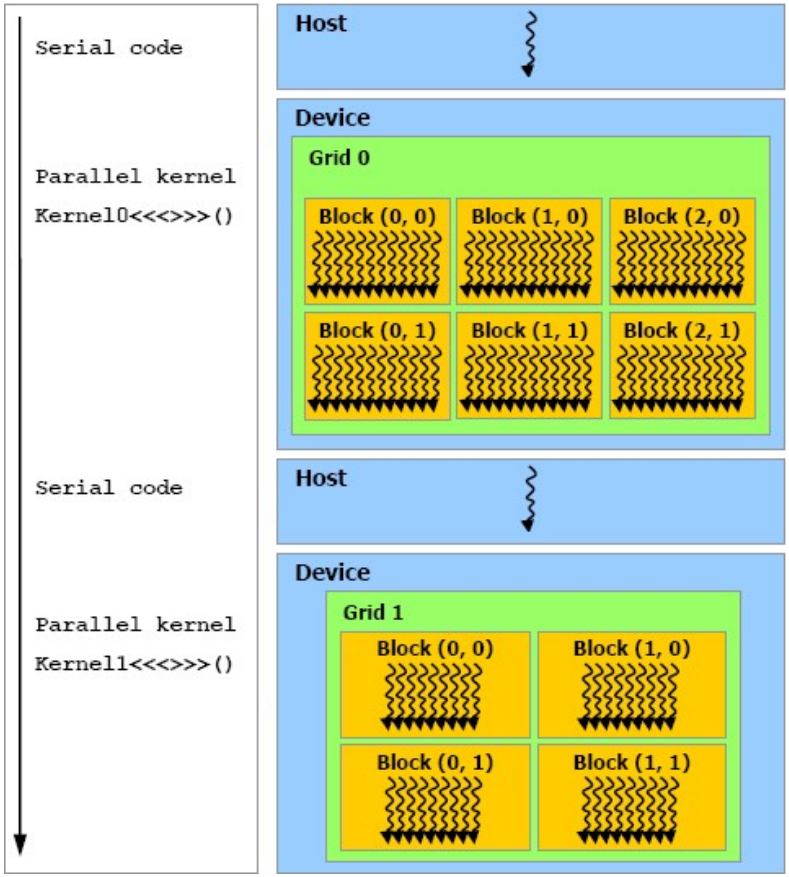
Eigenschaften der Grafikkarte:

```
CUDA Device Query...
There are 1 CUDA devices.
CUDA Device #0
Major revision number:          1
Minor revision number:          3
Name:                           Tesla C1060
Total global memory:            4294770688
Total shared memory per block:  16384
Total registers per block:      16384
Warp size:                      32
Clock rate:                     1296MHz
Memory Bandwidth:               102 GB/sec
Total constant memory:          65536
Number of multiprocessors:      30
```

- Auf einem SM werden 32 Threads (1 **Warp**) parallel ausgeführt.
- Dies geschieht nach dem SIMD-Prinzip, daher sollten Programmverzweigungen vermieden werden (**Divergency**).
- Rechenleistung:

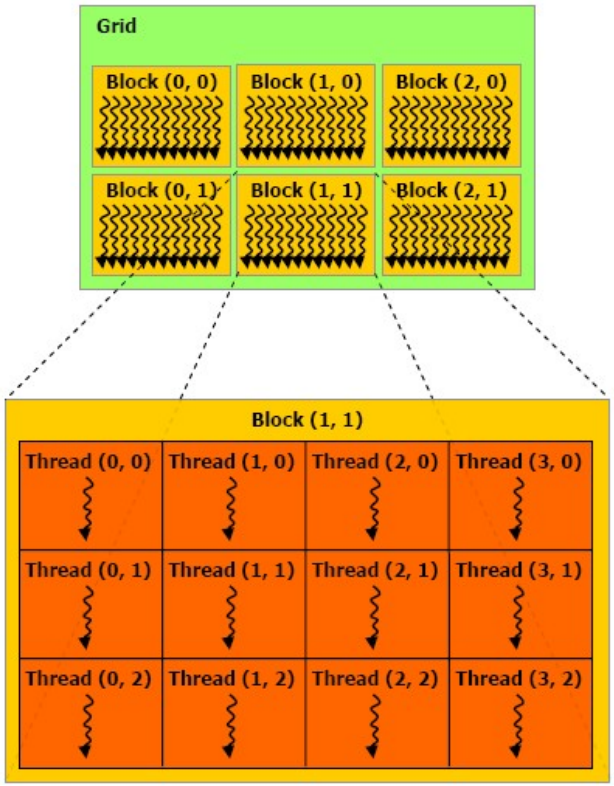
$$P_{single} = 3 Flops \cdot 1296 \cdot 10^6 Hz \cdot 240 \approx 933 GFlops/s$$
$$P_{double} = 2 Flops \cdot 1296 \cdot 10^6 Hz \cdot 30 \approx 78.8 GFlops/s$$

Das CUDA-Programmiermodell



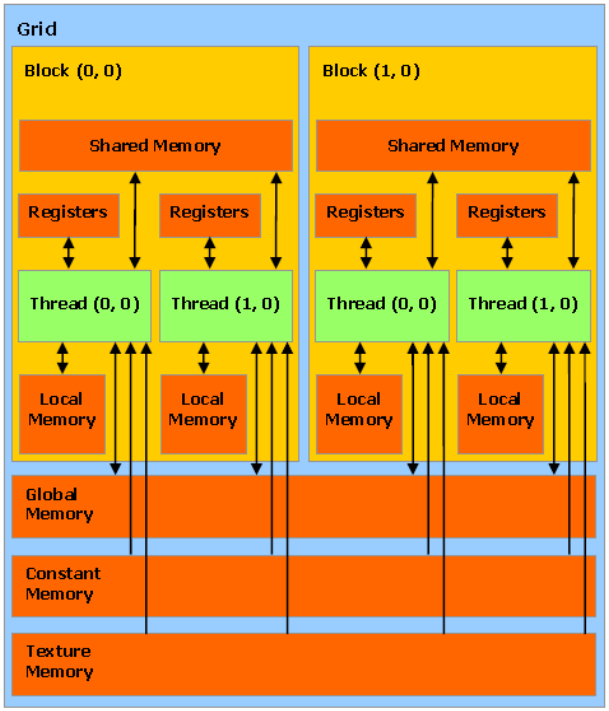
- Serielle Anteil des Programms wird auf dem **Host** (CPU) ausgeführt.
- Parallele Anteil des Programms wird auf das **Device** (GPU) ausgelagert.
- Wechsel vom Host auf das Device erfolgt über Funktionen, welche als **Kernel** bezeichnet werden.
- Auf jedem Thread wird eine Instanz des Kernels ausgeführt.

Das CUDA-Programmiermodell



- Threads sind in Blöcke (**Blocks**) gruppiert, welche wiederum in Gitter (**Grids**) gruppiert sind.
- Die Threadindizierung erfolgt jeweils dreidimensional.
- Threads innerhalb eines Blocks werden auf einem Multiprozesser ausgeführt, können daher synchronisiert werden und über den Shared-Memory kommunizieren.
- Blöcke werden unabhängig voneinander abgearbeitet.

Das CUDA-Programmiermodell



- Arbeitsspeicher (Host-Memory):
  Schlechteste Bandbreite, daher Kopiervorgänge vermeiden.
- Globaler Speicher (Global-Memory):
  Bandbreite gering im Vergleich zur Rechenleistung. Hier sollte **Coalescing** angestrebt werden sowie Zugriffe minimiert werden.
- Register:
  Schnellster Speicher.
- Gemeinsamer Speicher (Shared-Memory):
  Kommunikation innerhalb eines Blocks. Gleiche Geschwindigkeit wie Register, sofern keine **Bankkonflikte** auftreten.
- Texturen:
  Ähnlich wie Global Memory,
  lesender Zugriff gecacht.

Ein einfaches Beispiel: SAXPY-Operation

```
__global__ void k_saxpy(double *erg, double *x, double *y, double alpha,
        int dim){
  int index=blockIdx.x*blockDim.x+threadIdx.x;  //globale Thread-ID
  if(index<dim)
    erg[index]=alpha*x[index]+y[index];
}
int main (int argc, char * const argv[]){
  int dim=100000;
  //Anlegen der Vektoren auf dem Host
  double* x=(double*)malloc(sizeof(double)*dim);
  double* y=(double*)malloc(sizeof(double)*dim);
  double* erg=(double*)malloc(sizeof(double)*dim);
  double alpha=5.0;
  //Anlegen der Vektoren auf dem Device
  double *d_x, *d_y, *d_erg;
  cudaMalloc((void**)&d_x, dim*sizeof(double));
  cudaMalloc((void**)&d_y, dim*sizeof(double));
  cudaMalloc((void**)&d_erg, dim*sizeof(double));
  //Vektoren x und y mit Werten belegen
  //Vektoren auf Device kopieren
  cudaMemcpy(d_x, x, dim*sizeof(double), cudaMemcpyHostToDevice);
  cudaMemcpy(d_y, y, dim*sizeof(double), cudaMemcpyHostToDevice);
  //Kernelaufruf
  dim3 dimBlock(128);
  dim3 dimGrid(dim/dimBlock.x+1);
  k_saxpy<<<dimGrid,dimBlock>>>(d_erg,d_x,d_y,alpha,dim);
  //Ergebnis auf Host kopieren
  cudaMemcpy(erg,d_erg,dim*sizeof(double),cudaMemcpyDeviceToHost);
  //Speicherfreigabe
  cudaFree(d_x); cudaFree(d_y); cudaFree(d_erg);
  free(x); free(y); free(erg);
  return 0;
}
```

Erinnerung:
In dem Solver müssen in jedem Zeitschritt drei LGS der Form $Ax = b, A \in \mathbb{R}^{N,N}$, gelöst werden.

Hierfür soll das **CG-Verfahren** verwendet werden:

- gehört zur Klasse der Krylov-Unterraum-Verfahren
- iteratives Lösungsverfahren
- anwendbar bei symmetrisch, positiv definiter Systemmatrix A
- besonders geeignet für dünnbesetzte Matrix A
- konvergiert nach spätestens N Iterationen in exakter Arithmetik

Im Folgenden soll eine Parallelisierung des CG-Verfahrens präsentiert werden.

Algorithm 1 CG-Verfahren zur Lösung von $Ax = b$ (Pseudocode)

Input: $A \in \mathbb{R}^{N,N}$, $b, x_0 \in \mathbb{R}^N$, $MAXIT \in \mathbb{N}$, $tol \in \mathbb{R}_+$
Output: Lösung $x \in \mathbb{R}^N$

$r_0 = b - Ax_0$
$p_0 = r_0$
for $j = 1$ to $MAXIT$ **do**
  $\gamma_{j-1} = (r_{j-1}^T r_{j-1})/(p_{j-1}^T Ap_{j-1})$
  $x_j = x_{j-1} + \gamma_{j-1} p_{j-1}$
  $r_j = r_{j-1} - \gamma_{j-1} Ap_{j-1}$
  if $\|r_j\|_2 / \|r_0\|_2 < tol$ **then**
    return x_j
  end if
  $\beta_j = r_j^T r_j / r_{j-1}^T r_{j-1}$
  $p_j = r_j + \beta_j p_{j-1}$
end for

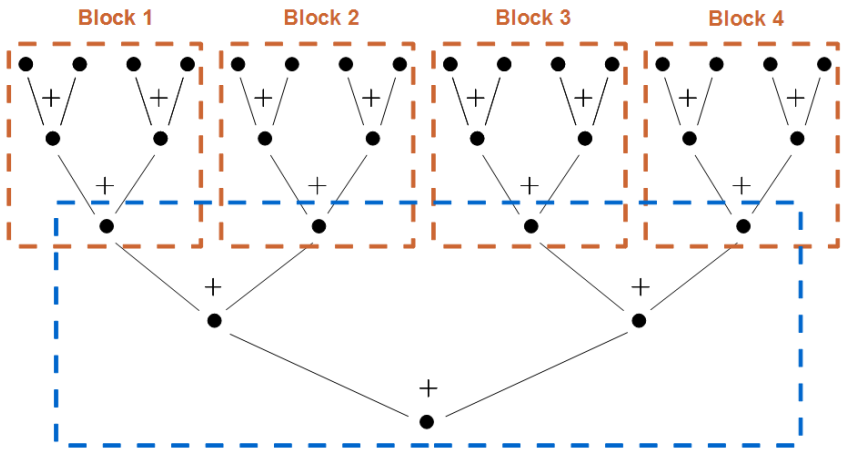
Aufwändige Operationen sind hierbei:

- SAXPY-Operation
- Skalarprodukt bzw. Norm (blau)
- Matrix-Vektor Multiplikation (rot)

Skalarprodukt

Generelle Idee:

- Das Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren, kann in Teilsummen unabhängig voneinander berechnet werden.
- Jeder Thread berechnet n Produkte und summiert diese auf.
- Anschließend werden alle Teilsummen innerhalb des Blockes summiert.
- Ein zweiter Kernel summiert wiederum die Ergebisse der Blöcke.

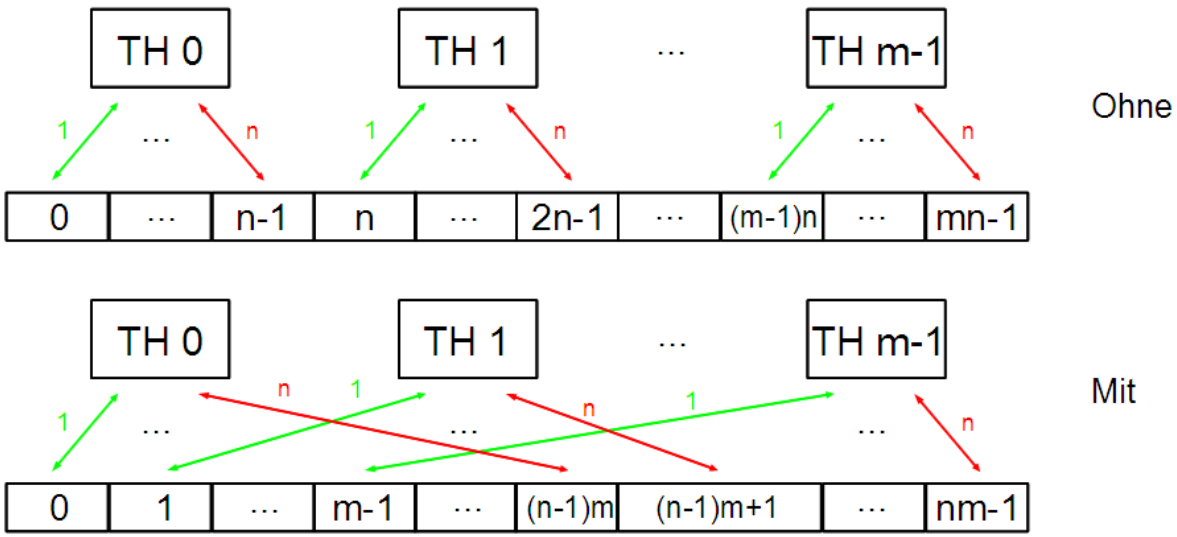


Erster Implementierung:

```
__global__ void k_skp1(Real *c, Real *a, Real *b, int dim){

  //Anzahl der von jedem Thread zu berechnenden Produkte
  int n=dim/(blockDim.x*gridDim.x+1)+1;
  extern __shared__ Real shared_summands[];
  Real sum=0.0;

  //Berechnung der Produkte und Aufsummation innerhalb des Thread
  int index=(blockIdx.x*blockDim.x+threadIdx.x)*n;   //Startindex
  for(int i=0;i<n;i++){
    if((index+i)<dim)
      sum+=a[index+i]*b[index+i];
  }
  //Abspeicherung der Teilsumme im Shared-Memory
  shared_summands[threadIdx.x]=sum;

  //Berechnung der Teilsumme des gesamten Blockes
  __syncthreads();
  for(int s=1; s<blockDim.x; s*=2){
    if(threadIdx.x%(2*s) == 0){
      shared_summands[threadIdx.x] += shared_summands[threadIdx.x+s];
    }
    __syncthreads();
  }
  //Abspeicherung der Teilsumme des gesamten Blocks im Global-Memory
  if(threadIdx.x==0)
    c[blockIdx.x] = shared_summands[0];
}
```

Verbesserung: Mit Coalescing

- Auf Global Memory wird segmentweise zugegriffen.
- Liegen die Elemente eines Warps innnerhalb eines Segments, so kann der Zugriff zusammmengefasst werden.



Bei diesem Beispiel gibt es m Threads, die jeweils auf n Elemente zugreifen.

Verbesserung: Ohne Divergency

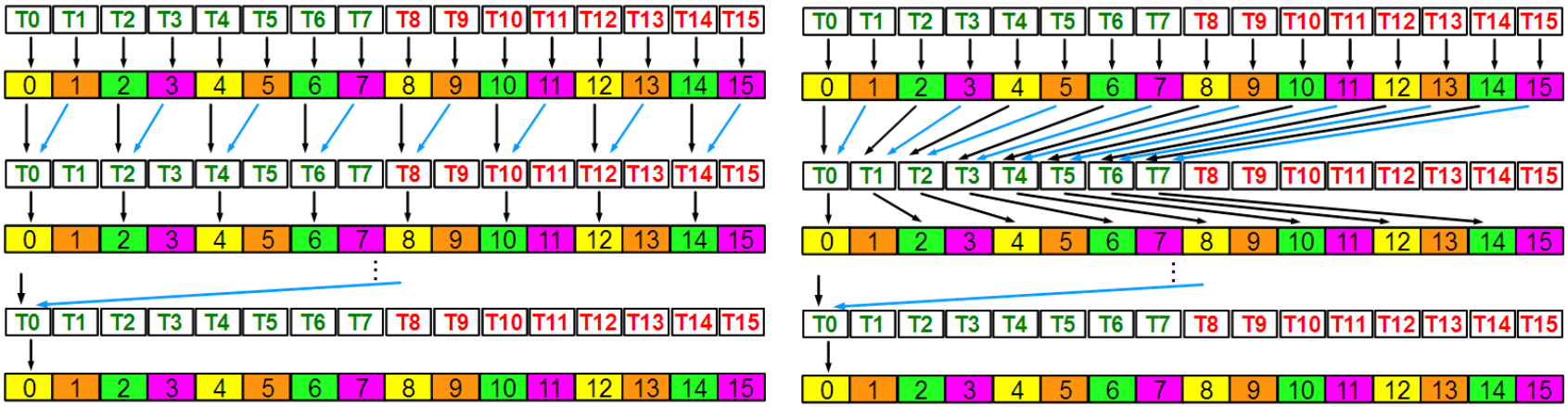


Abbildung: Links mit Divergency, rechts ohne

Vereinfachende Annahme: Ein Warp besteht aus 8 Threads und der Shared-Memory besteht aus 4 Speicherbänken.

Verbesserung: Ohne Bankkonflikte

- Shared-Memory ist in 16 Bänken organisiert
- Elemente liegen in jeweils nach einander folgenden Bänken

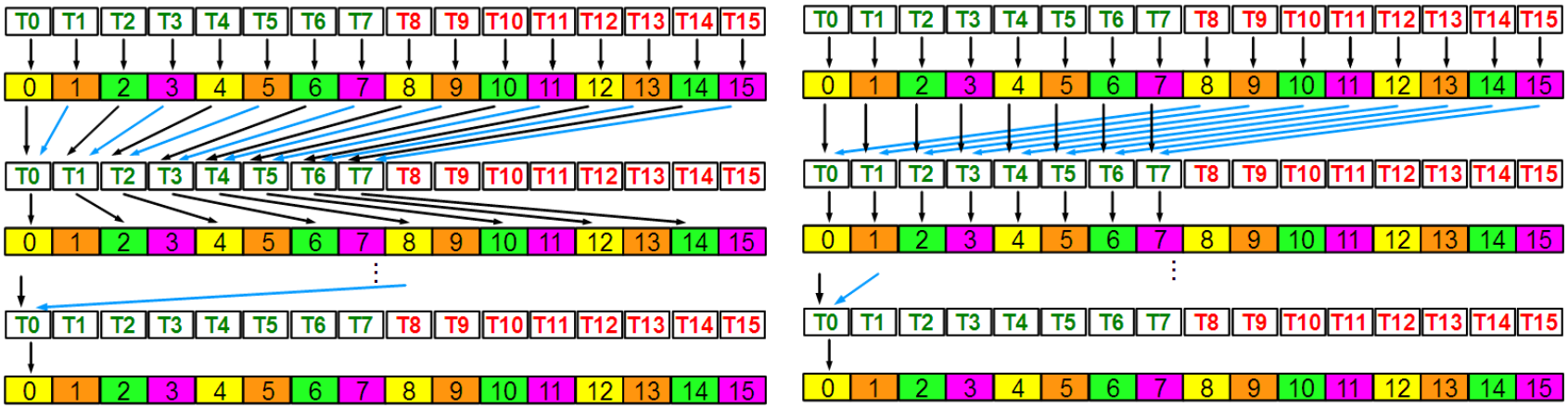


Abbildung: Links mit Bankkonflikten, rechts ohne

Vereinfachende Annahme: Auch hier besteht ein Warp aus 8 Threads und der Shared-Memory aus 4 Speicherbänken.

Weitere Verbesserungen:

- Reduzierung von if-Abfragen
- Abrollen der for-Schleife, welche die Teilsumme innerhalb des Blockes bildet
- Extra-Funktion zur Berechnung der Norm, bei der der Zugriff auf den Global-Memory halbiert wurde

Zeitmessungen: Skalarprodukt

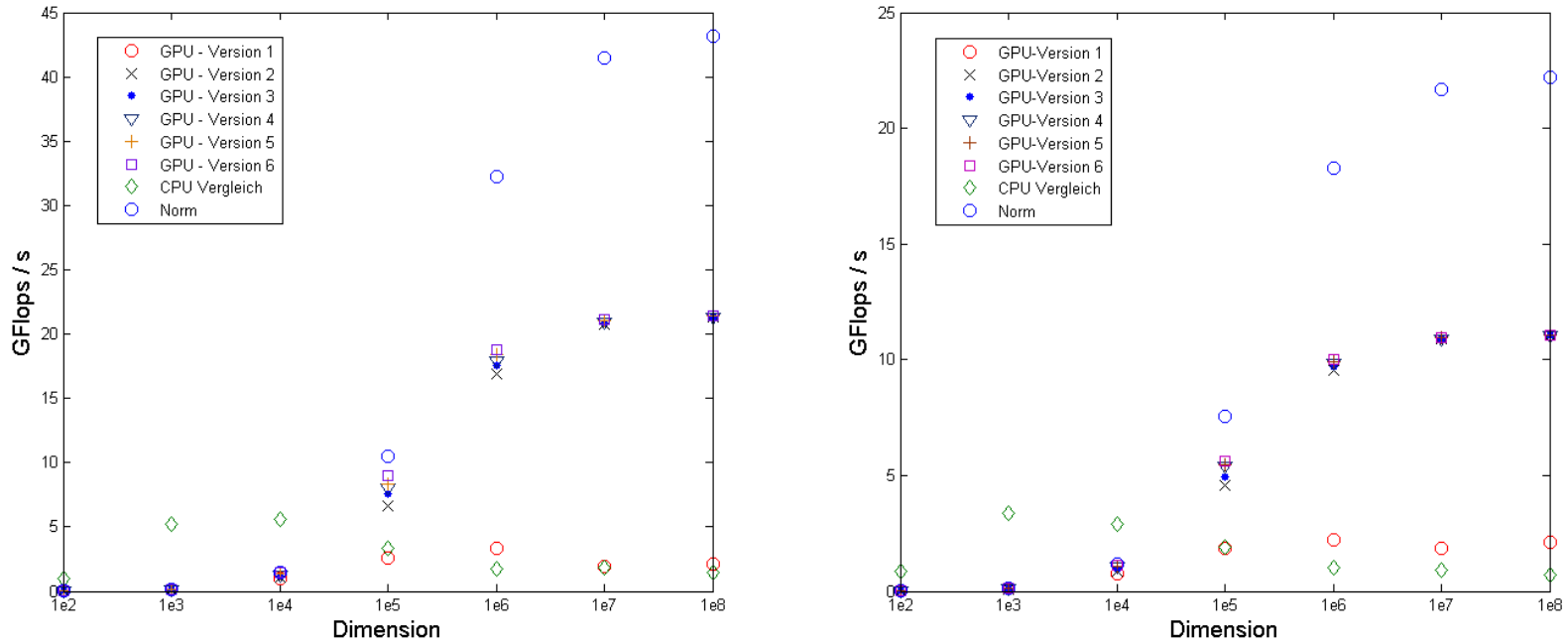


Abbildung: Vergleich der Performance der verschiedenen Skalarprodukt Implementierungen für einfache (links) und doppelte (rechts) Genauigkeit.

$$P_{single} = \frac{102\,GByte/s \cdot 2\,Flops}{2 \cdot 4\,Byte} = 25.5\,GFlops/s \quad P_{double} = \frac{102\,GByte/s \cdot 2\,Flops}{2 \cdot 8\,Byte} = 12.75\,GFlops/s$$

Matrix-Vektor Multiplikation

Zum Speichern von Bandmatrizen, eignet sich das DIA-Format:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 7 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 8 & 0 \\ 5 & 0 & 3 & 9 \\ 0 & 6 & 0 & 4 \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \text{data} = \begin{bmatrix} * & 1 & 7 \\ * & 2 & 8 \\ 5 & 3 & 9 \\ 6 & 4 & * \end{bmatrix}, \quad \text{offset} = \begin{bmatrix} -2 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Generelle Idee:

- Diagonalen werde in einer Matrix `data` gespeichert.
- Der `offset`-Vektor enthält den Abstand der Diagonalen von der Hauptdiagonalen.

Erste Implementierung:

```
__global__ void k_spmv_dia1 (Real* y,          //Ergebnisvektor
                             Real* data,       //data-Matrix
                             int *offsets,     //Offsetvektor
                             Real *x,          //Vektor
                             int dim_r,        //#Zeilen der Sparsematrix
                             int dim_c,        //#Spalten der Sparsematrix
                             int dim_offsets,  //#Diagonalen
                             int stride){
  //Berechnung der Zeile
  int row = blockDim.x * blockIdx.x + threadIdx.x;
  if(row < dim_r){
    Real dot = 0.0;
    for ( int n = 0; n < dim_offsets ; n++){
      //Berechnung der Spalte
      int col = row + offsets [n];
      if( col >= 0 && col < dim_c)
        dot += data[stride * n + row] * x[col];
    }
    y[row] = dot;
  }
}
```

- Jeder Thread berechnet ein Element des Ergebnisvektors (Zeile der Matrix mal Vektor)

Verbesserung: Nutzung von Shared-Memory

```
__global__ void k_spmv_dia2(Real* y, Real* data, int *offsets, Real *x,
                            int dim_r, int dim_c , int dim_offsets, int
                                stride){
  int row = blockDim.x * blockIdx.x + threadIdx.x;


  extern __shared__ int shared_offsets[];
  if(threadIdx.x < dim_offsets)
    shared_offsets[threadIdx.x] = offsets[threadIdx.x];
  __syncthreads();


  if(row < dim_r ){
    Real dot = 0.0;
    for ( int n = 0; n < dim_offsets ; n ++){
      int col = row + shared_offsets[n];
      Real val = data[dim_r * n + row];
      if( col >= 0 && col < dim_c)
        dot += val * x[col];
    }
    y[row] = dot;
  }
}
```

- Reduzierung des Zugriffs auf den Global-Memory durch Speichern des `offset`-Vektor im Shared-Memory

Verbesserung: Nutzung von Texturen

```
__global__ void k_spmv_dia3(Real* y, Real* data, int *offsets, Real *x,
                            int dim_r, int dim_c , int dim_offsets, int
                                stride){
  int row = blockDim.x * blockIdx.x + threadIdx.x;
  Real d;
  extern __shared__ int shared_offsets[];
  if(threadIdx.x < dim_offsets)
    shared_offsets[threadIdx.x] = offsets[threadIdx.x];
  __syncthreads();
  if(row < dim_r ){
    Real dot = 0.0;
    for ( int n = 0; n < dim_offsets ; n ++){
      int col = row + shared_offsets[n];
      Real val = data[dim_r * n + ro w];
      if( col >= 0 && col < dim_c){

        #if PRAEZISSION == 2
          int2 temp = tex1Dfetch(Tex, col);
          d = __hiloint2double(temp.y, temp.x);
        #else
          d = tex1Dfetch(Tex, col);
        #endif
        dot += val * d;

      }
    }
    y[row] = dot;
  }
}
```

Zeitmessungen: Matrix-Vektor Multiplikation

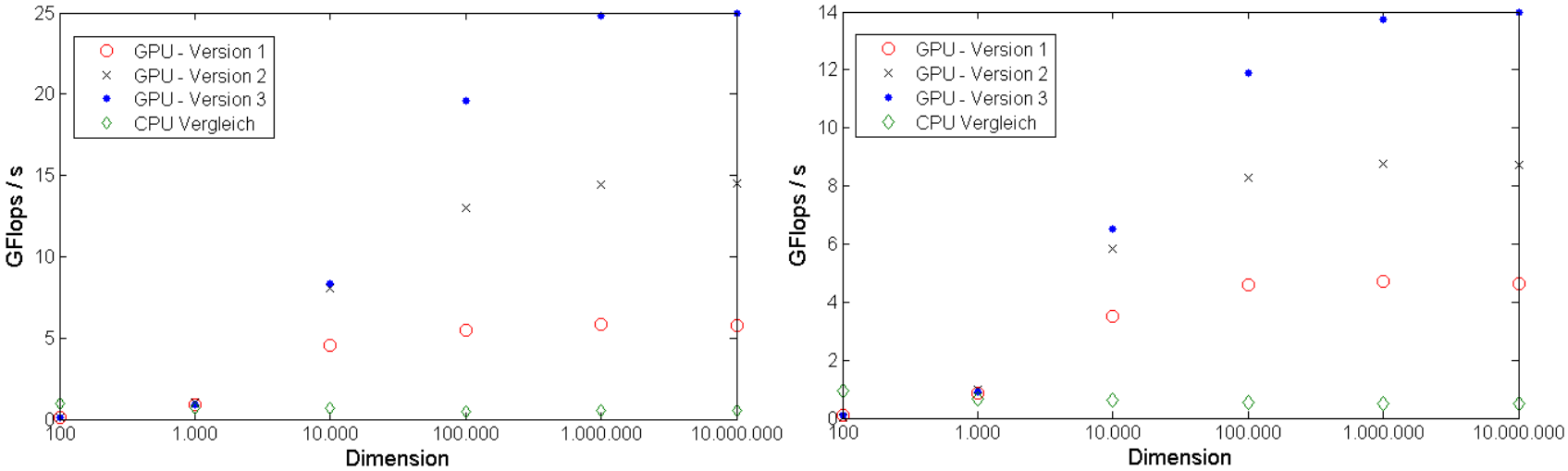


Abbildung: Vergleich der Performance der verschiedenen Matrix-Vektor Implementierungen für einfache (links) und doppelte (rechts) Genauigkeit.

$$P_{single} = \frac{102\,GByte/s \cdot 5 \cdot dim \cdot 2Flops}{(5+5+1) \cdot dim \cdot 4Byte} = 23.2\,GFlops/s$$

$$P_{double} = \frac{102\,GByte/s \cdot 5 \cdot dim \cdot 2Flops}{(5+5+1) \cdot dim \cdot 8Byte} = 11.6\,GFlops/s$$

SpeedUp: CG-Verfahren

Es wurden drei Versionen des CG-Verfahrens implementiert:

- Die erste Version CG_CPU_DIA ist eine sequentielle Version auf der CPU.
- Die zweite Version CG_GPU_DIA1 ist eine parallele Version die auf der GPU läuft, die das LGS vom Arbeisspeicher läd und das Ergbnis wieder im Arbeitsspeicher abspeichert
- Die dritte Version CG_GPU_DIA2 lädt das LGS im Vergleich zur zweiten Version direkt aus dem Global-Memory und speichert dort auch das Ergebnis.

Gitter	LGS	Iter.	CG_GPU_DIA1		CG_GPU_DIA2		CG_CPU_DIA	
64×64	A_h	225	$22.52ms$	$0.77GF$	$22.06ms$	$0.79GF$	$156ms$	$0.11GF$
64×64	B_h^w	15	$1.63ms$	$0.74GF$	$1.50ms$	$0.80GF$	$10.9ms$	$0.11GF$
64×64	B_h^T	1	$0.29ms$	$0.45GF$	$0.16ms$	$0.81GF$	$0.80ms$	$0.16GF$
256×256	A_h	932	$151.5ms$	$7.94GF$	$149.9ms$	$8.03GF$	$12.57s$	$0.10GF$
256×256	B_h^w	54	$10.34ms$	$6.82GF$	$8.78ms$	$8.04GF$	$631ms$	$0.11GF$
256×256	B_h^T	1	$1.70ms$	$1.30GF$	$0.26ms$	$8.29GF$	$13.29ms$	$0.17GF$
1024×1024	A_h	3786	$4.68s$	$16.9GF$	$4.65s$	$17.0GF$	$11.4min$	$0.12GF$
1024×1024	B_h^w	215	$0.28s$	$16.3GF$	$0.27s$	$17.0GF$	$40.8s$	$0.11GF$
1024×1024	B_h^T	2	$13.6ms$	$4.16GF$	$3.24ms$	$17.4GF$	$0.4s$	$0.13GF$

Gitter	LGS	Iter.	CG_GPU_DIA1		CG_GPU_DIA2		CG_CPU_DIA	
64×64	A_h	202	$22.75ms$	$0.69GF$	$22.96ms$	$0.68GF$	$137ms$	$0.11GF$
64×64	B_h^w	15	$1.97ms$	$0.61GF$	$1.68ms$	$0.72GF$	$10.8ms$	$0.11GF$
64×64	B_h^T	1	$0.36ms$	$0.36GF$	$0.18ms$	$0.74GF$	$1.31ms$	$0.10GF$
256×256	A_h	801	$182.4ms$	$5.67GF$	$180.5ms$	$5.73GF$	$9011ms$	$0.11GF$
256×256	B_h^w	54	$14.46ms$	$4.88GF$	$12.21ms$	$5.78GF$	$624ms$	$0.11GF$
256×256	B_h^T	1	$2.48ms$	$0.88GF$	$0.36ms$	$6.03GF$	$22.35ms$	$0.10GF$
1024×1024	A_h	3564	$7.45s$	$9.99GF$	$7.39s$	$10.08GF$	$10.1min$	$0.12GF$
1024×1024	B_h^w	215	$0.47s$	$9.67GF$	$0.45s$	$10.04GF$	$40.66s$	$0.11GF$
1024×1024	B_h^T	2	$21.8ms$	$2.59GF$	$5.36ms$	$10.52GF$	$0.57s$	$0.11GF$

Tabelle: Zeitmessungen CG-Verfahren in einfacher (oben) und doppelter (unten) Genauigkeit

SpeedUp: Zeitschritt des Solvers

Gitter	Version	Gesamt	LGS lösen	Abspeichern	Rest
64×64	GPU_1	$53.35ms$	$26.06ms$	$26.70ms$	$0.58ms$
64×64	GPU_2	$52.89ms$	$25.41ms$	$27.19ms$	$0.30ms$
64×64	CPU	$204.6ms$	$176.7ms$	$27.40ms$	$0.50ms$
256×256	GPU_1	$0.53s$	$0.17s$	$0.34s$	$6.72ms$
256×256	GPU_2	$0.52s$	$0.17s$	$0.35s$	$0.85ms$
256×256	CPU	$13.02s$	$12.67s$	$0.34s$	$6.83ms$
1024×1024	GPU_1	$12.00s$	$5.27s$	$6.62s$	$0.11s$
1024×1024	GPU_2	$11.74s$	$5.20s$	$6.53s$	$10.35ms$
1024×1024	CPU	$9.13min$	$9.03min$	$5.50s$	$0.13s$

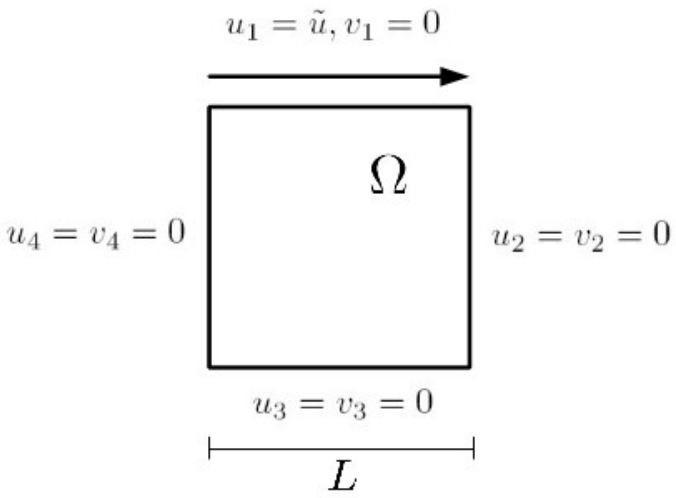
Gitter	Version	Gesamt	LGS lösen	Abspeichern	Rest
64×64	GPU_1	$52.84ms$	$24.98ms$	$27.36ms$	$0.5ms$
64×64	GPU_2	$51.68ms$	$23.97ms$	$27.41ms$	$0.31ms$
64×64	CPU	$178.4ms$	$150.1ms$	$27.76ms$	$0.5ms$
256×256	GPU_1	$0.58s$	$0.21s$	$0.37s$	$7.1ms$
256×256	GPU_2	$0.56s$	$0.20s$	$0.35s$	$0.93ms$
256×256	CPU	$9.90s$	$9.56s$	$0.34s$	$7.06ms$
1024×1024	GPU_1	$16.02s$	$7.63s$	$8.27s$	$0.13s$
1024×1024	GPU_2	$15.67s$	$7.41s$	$8.25s$	$12.3ms$
1024×1024	CPU	$9.15min$	$9.07min$	$5.45s$	$0.13s$

Tabelle: Zeitmessungen eines Zeitschritts bei einfacher (oben) und doppelter (unten) Genauigkeit

Zur Validierung der Implementierung werden **Numerische Tests** durchgeführt.
Hierzu werden die verwendeten Stoffparameter auf die Werte von Wasser bei einem Druck von $p = 1bar$ und einer Umgebungstemperatur von $T_0 = 20\ ^\circ\mathrm{C}$ gesetzt:

Parameter	Wert
kinematische Viskosität	$\nu = 1000\ m^2 s^{-1}$
Wärmeleitfähigkeit	$\lambda = 0.597\ Wm^{-1}K^{-1}$
Dichte	$\rho = 1000\ kg\ m^{-3}$
Wärmekapazität	$c_w = 4187\ J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
therm. Ausdehnungskoeffizient	$\beta = 0.21 \cdot 10^{-3}\ K^{-1}$

Versuchsaufbau:



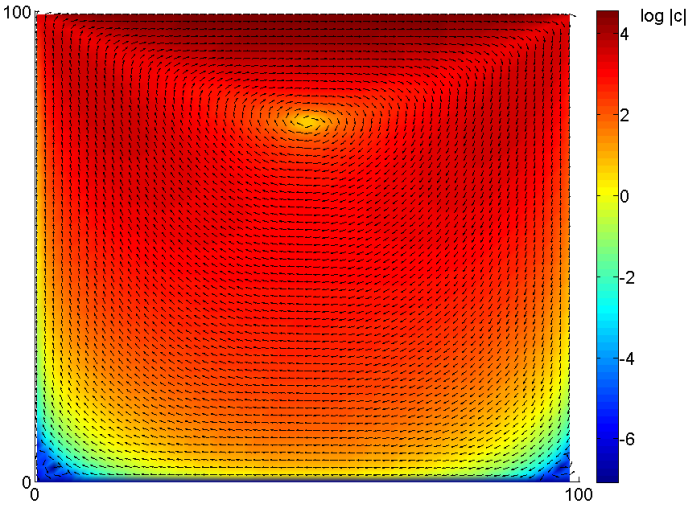


Abbildung: Driven Cavity Versuch mit $Re = 1$

Der Versuch wird für verschiedene Reynoldszahlen $Re := \frac{\tilde{u} \cdot L}{\nu}$ durchgeführt.

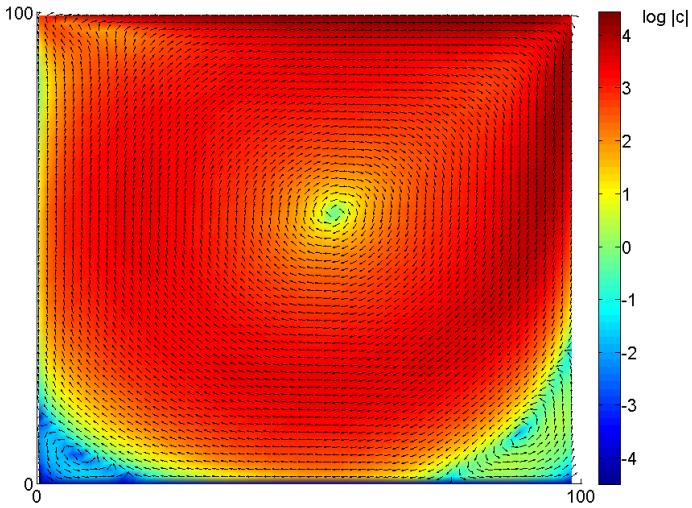


Abbildung: Driven Cavity Versuch mit $Re = 100$

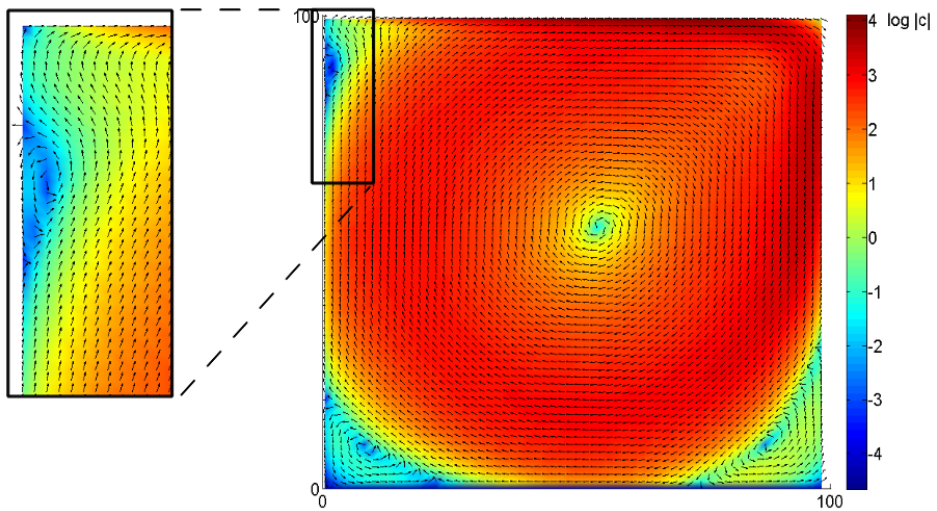
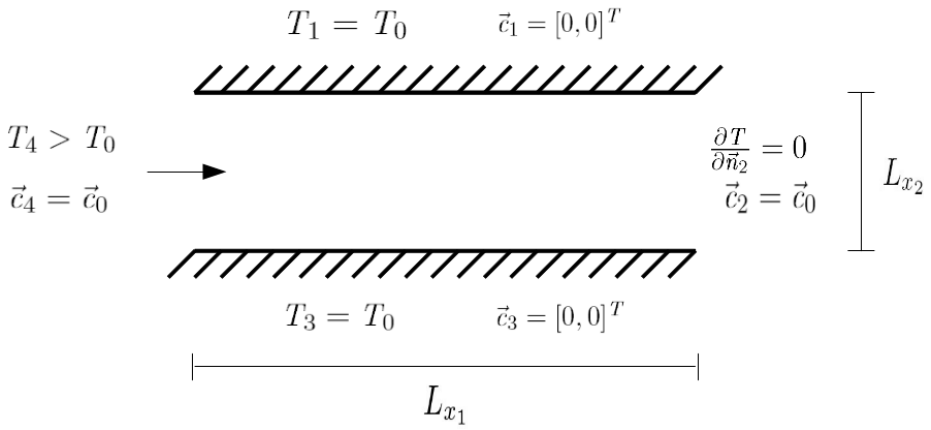
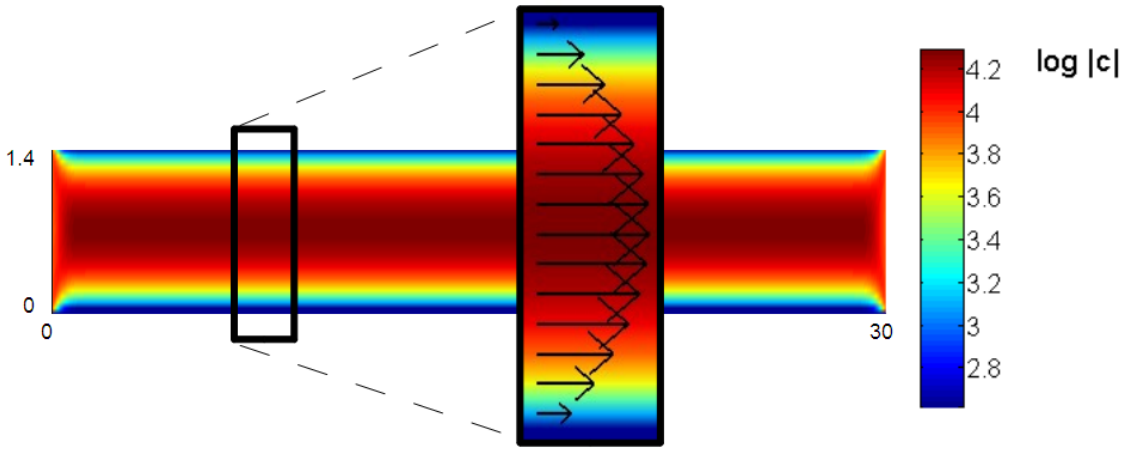


Abbildung: Driven Cavity Versuch mit $Re = 3.333$

Versuchsaufbau:





$$u(x_2) = 6u_0 \frac{x_2}{h}\left[1 - \frac{x_2}{h}\right]$$

Abbildung: Geschwindigkeitsprofil bei der Kanalströmung

Ebene Poisseuille-Strömung

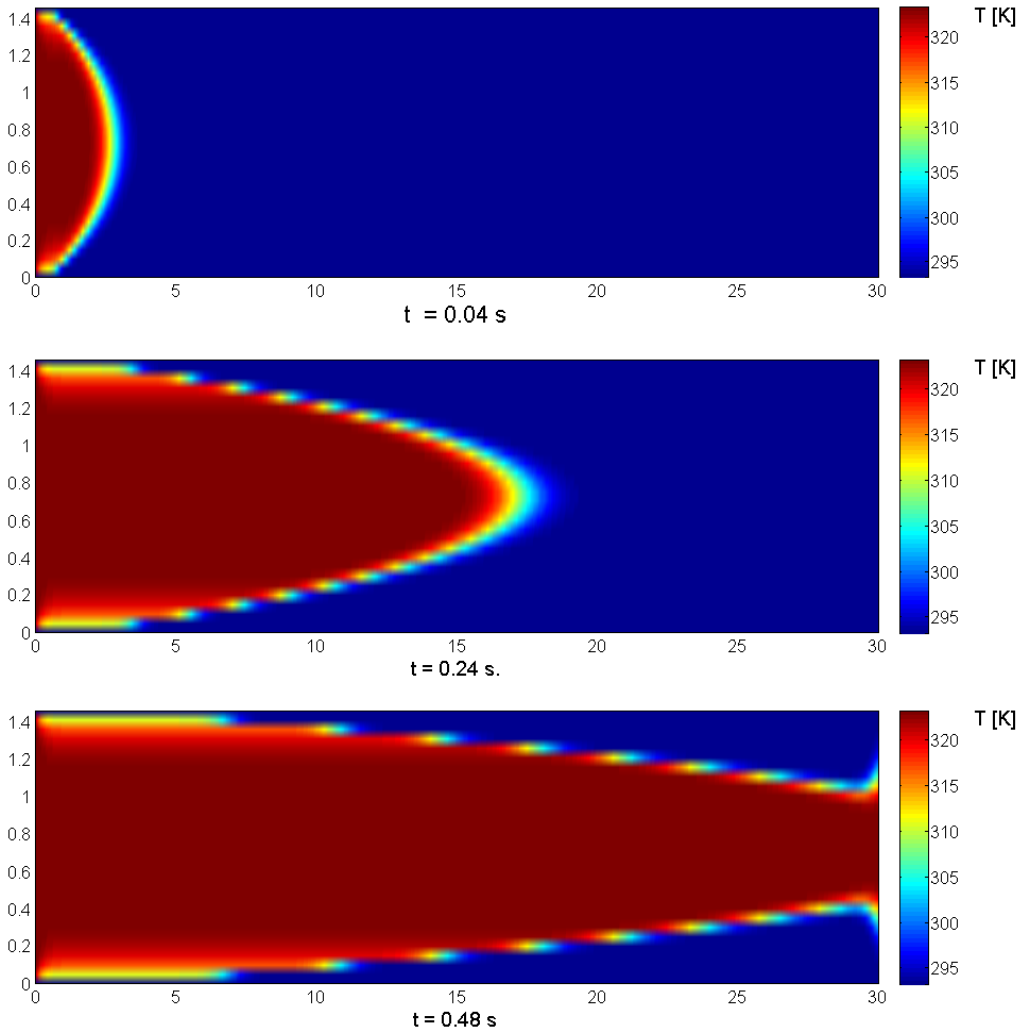
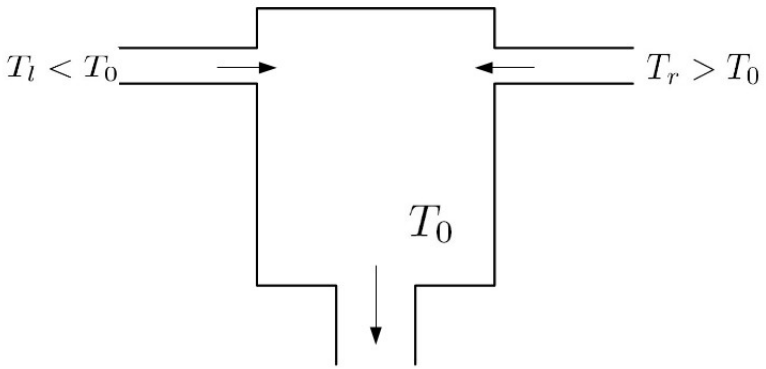


Abbildung: Temperaturverteilung bei einer Kanalströmung zu verschiedenen Zeitpunkten

Versuchsaufbau:



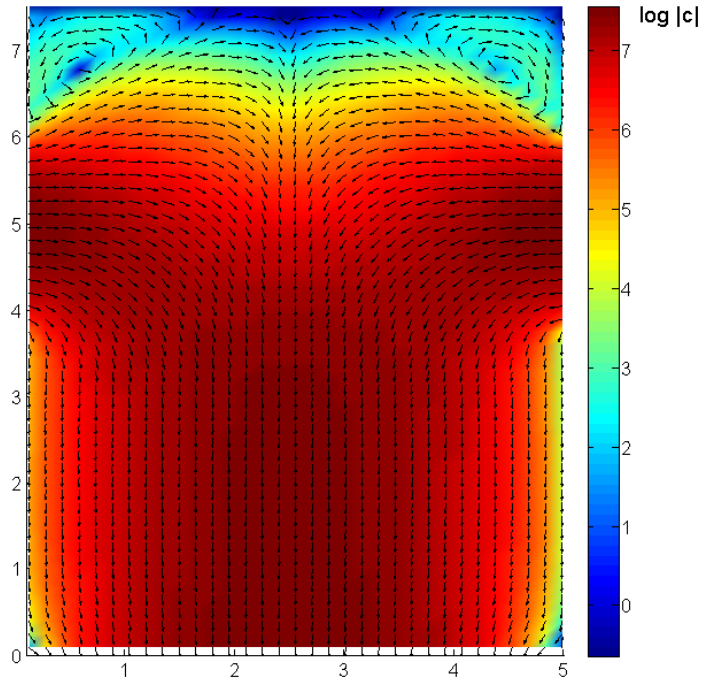


Abbildung: Geschwindigkeitsverteilung bei der Mischung zweier Strömungen

Mischung zweier Fluide

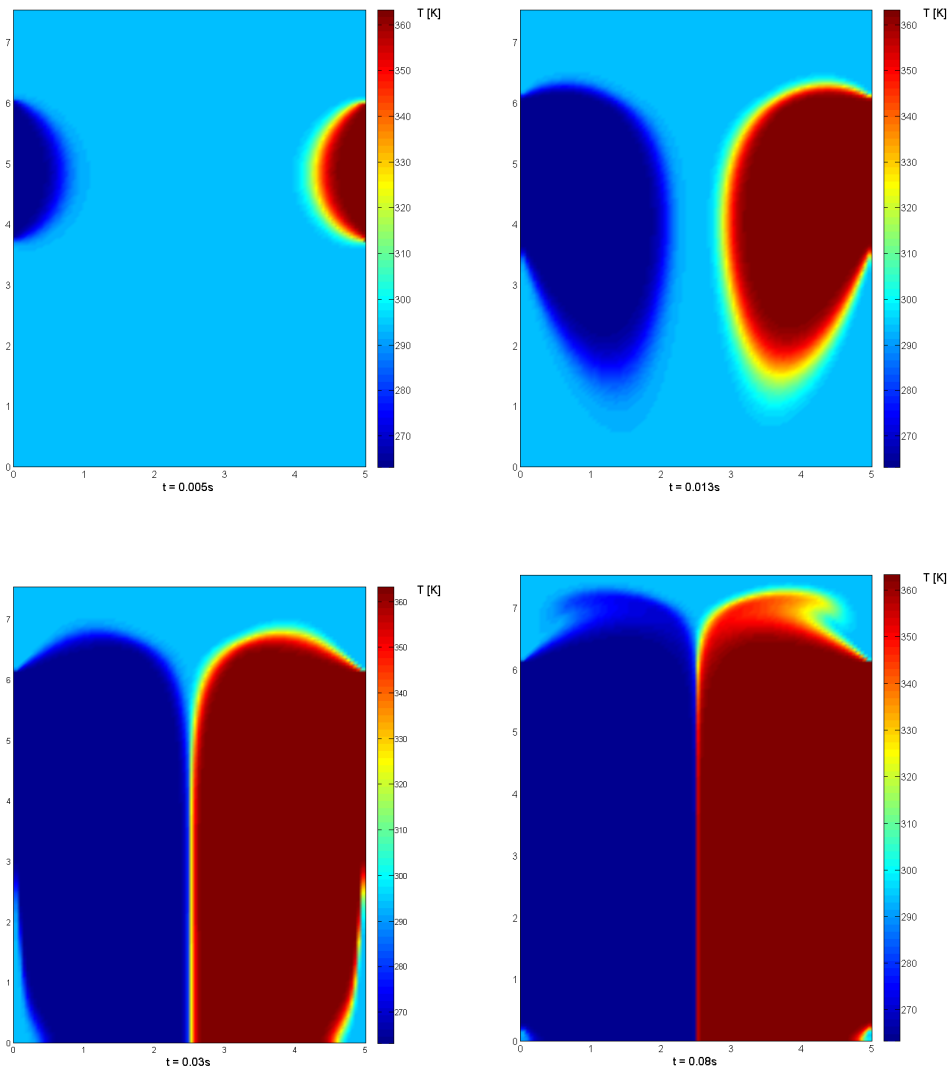
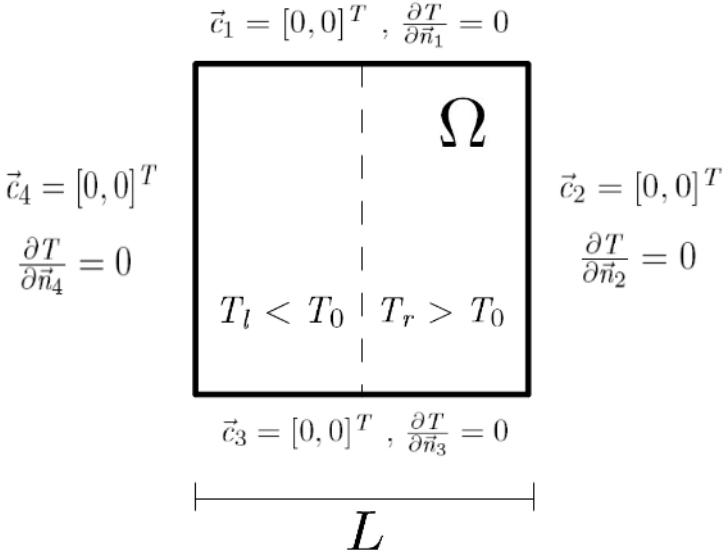


Abbildung: Temperaturverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten

Versuchsaufbau:



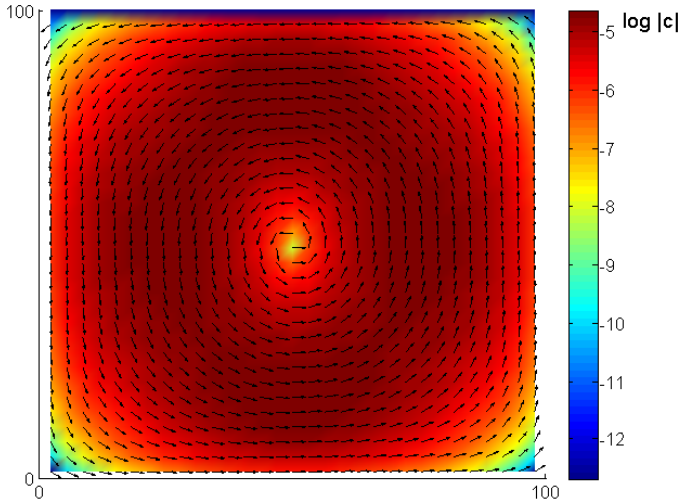


Abbildung: Geschwindigkeitsfeld durch Diffusion

- Bei diesem Versuch soll die Wärmeleitung die Wärmekonvektion überwiegen.

Diffusion

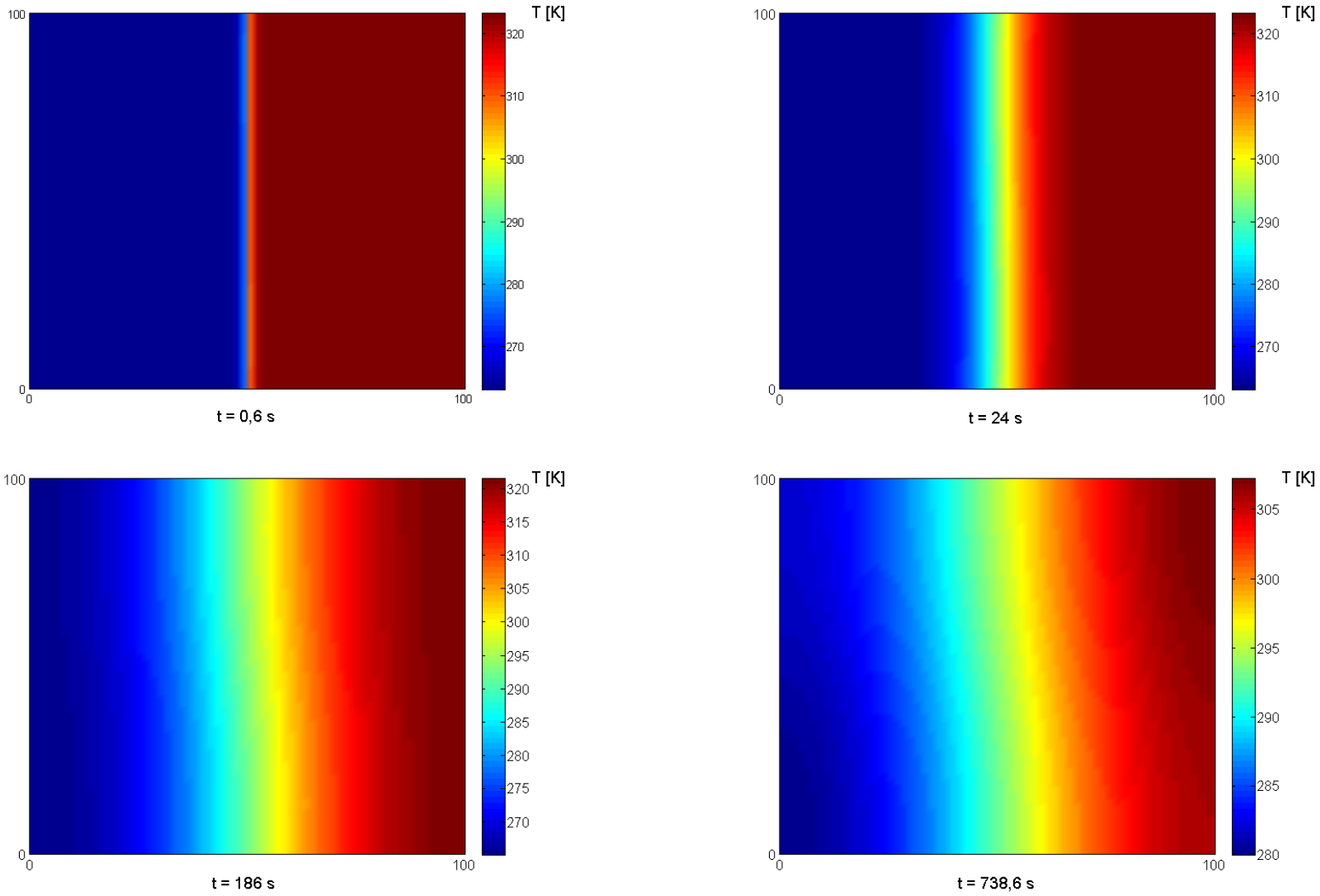


Abbildung: Temperaturverteilung durch Diffusion

Zusammenfassung und Ausblick

- Entwicklung eines **2d-Strömungslösers** mit guten Ergebnissen.
- Bei numerischen Simulationen stellt das Lösen von linearen Gleichungssystemen typischerweise den Hauptaufwand des Algorithmus dar: Hierfür wurde in CUDA ein parallelisiertes CG-Verfahren mit bis zu **35-facher Beschleunigung** implementiert.
- Die Angabe der Rechenleistung von GPUs sind theoretische Maximalwerte und nur bei speziellen Problemen erreichbar.
- Als Flaschenhals stellte sich dabei vor allem die **Speicheranbindung** heraus.
- Die neu entwickelten FERMI Karten stellen eine weitere, wesentliche Verbesserung der Performance dar.

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!
Gibt es Fragen / Anmerkungen ?

...Wir wünschen frohe Weihnachten!