GPU 并行计算大作业

中国科学技术大学

格子玻尔兹曼方法求解圆柱绕流问题

姓　　名:	汪乘雲
学　　号:	SA21005050
学　　院:	工程科学学院
专　　业:	流体力学
授 课 老 师:	谭立湘
日　　期:	2022 年 5 月 16 日

目录

第一章 绪论

随着计算机技术的发展和现代流体力学计算方法的不断改进，计算流体力学 (CFD) 已经成为研究流体力学各种物理现象的重要工具。其中主流的算法包括有限体积法，有限差分法以及有限元法等等。

格子波尔茨曼方法 (Lattice Boltzmann Method，LBM) 作为诞生只有 30 多年的新兴算法，其应用一直是 CFD 领域研究的热点问题之一，其理论和应用研究也都取得了长足的进步。作为一种使用微观模型来模拟流体的宏观行为的介观方法，格子玻尔兹曼方法相比于传统的数值方法，可以比较方便的处理复杂的边界条件，计算效率更高效且具有很好的并行性，能够在大规模并行计算机上计算。由于是基于统计热物理的理论基础，所以在某些传统方法无法胜任的领域，比如微尺度流动与换热、多孔介质、磁流体、生物流体等领域，都可以进行有效模拟。

而随着科技技术的发展，计算流体力学针对的问题也越来越复杂，计算能力的需求也急剧增长，CPU 的发展速度已经难以满足。目前，GPU 凭借其强大的浮点计算能力和高数据吞吐量，已成为高性能计算的首选核心。所以，本文采用 OpenMP 和 CUDA 分别对 LBM 算法进行并行加速。

第二章 程序实现方法

2.1 格子玻尔兹曼方法

研究流体在宏观层次的连续介质方法所使用的是 NS 方程，而微观层次的统计力学所采用的方程是玻尔兹曼方程：

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \cdot \nabla f + \boldsymbol{F} \cdot \nabla_{\xi} f = \Omega(f) \tag{1}$$

其中，f 是流体粒子的概率密度分布函数，$\boldsymbol{F}$ 是系统所受的外力，$\Omega(f)$ 是碰撞算子。

标准的格子玻尔兹曼方法采用的是正方形 (二维) 网格或者正方体 (三维) 网格。以本文所选用的二维 D2Q9 模型为例，其中 0 号速度矢量是零矢量，1-8 号速度矢量指向相邻格点，速度矢量和加权系数表达形式为：

$$\boldsymbol{c} = c \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \tag{2}$$

$$\omega_i = \begin{cases} 4/9, & i = 0 \\ 1/9, & i = 1,2,3,4 \\ 1/36, & i = 5,6,7,8 \end{cases} \tag{3}$$

其中，c 是格子速度。定义在各个速度空间中的粒子分布函数 $f_i(x,t)$，在网格上使用 D2Q9 模型对玻尔兹曼方程进行离散，就得到格子玻尔兹曼方程 (Lattice Boltzmann Equation，LBE) 如下：

$$f_i(x+e_i\delta t, t+\delta t) - f_i(x,t) = \Omega_i(f),\ i=0,1,\cdots,8 \tag{4}$$

通常，LBE 的程序结构有两种形式，即碰撞-迁移结构和迁移-碰撞结构，以后者计算流程为例：1) 初始化分布函数

$$f_i(x,0),\ i=0,1,\cdots,8 \tag{5}$$

2) 执行迁移

$$f_i^{'}(x+e_i\delta t, t+\delta t) = f_i(x,t),\ i=0,1,\cdots,8 \tag{6}$$

3) 施加边界条件 4) 在时刻 $t+\delta t$ 执行碰撞

$$f_i(x+e_i\delta t, t+\delta t) = f_i^{'}(x+e_i\delta t, t+\delta t) + \Omega_i(f),\ i=0,1,\cdots,8 \tag{7}$$

5) 计算宏观量，包括流体密度、速度和压力等

$$\rho = \sum_{i=0}^{8} f_i, \quad u = \left[\sum_{i=0}^{8} e_i f_i + \frac{1}{2} f\delta t\right]/\rho, \quad p = \rho c_s^2 \tag{8}$$

6) 重复步骤 2)∼ 5) 直至满足终止条件。

2.2 基于 CPU 并行

基于 CPU 并行计算的目的是利用多个 CPU 或者多个 CPU 核的协同求解同一个问题，其实质是将一个待解决的问题分解为若干个子问题，然后各个子问题均由各个独立的 CPU 核同时进行计算，这就需要各个 CPU 核在计算的过程中频繁地交换数据。根据数据的通信方式，并行计算系统可以分为共享地址空间系统和消息传递系统。

在共享地址空间系统中，共享内存是指多个核心共享一个内存，内存的地址空间是统一的，从而实现多线程通信、同步、互锁等操作。存储器的分布方式分为集中式和分布式，如果存储器是集中式的，所有的 CPU 对内存的访问速度一样，这种系统称为共享内存多处理器系统，如果存储器的分布式的，CPU 对内存的访问速度只与内存的位置有关，这种系统称为分布式共享内存多处理器系统。目前，基于共享内存模式的主流开发标准是 OpenMP，它是一种基于数据并行的编程模式，即对不同的数据执行相同的代码。

在消息传递系统中，每个计算节点都是一个独立的计算机系统，每个节点的存储器都是单独编码，不能跨节点访问，而当节点间需要数据传递，节点会通过发送包含数据的消息。目前，基于消息传递的主流开发标准是 MPI，它是针对多地址空间进行的多进

程异步并行模式，其特征是显式同步，显式通信，显式的数据映射和负载分配。MPI 都拥有很高的可移植性和优秀的并行加速能力，但是其编码比较复杂、冗长，开发效率低，可靠性低，一个进程出错就会导致程序崩溃，需要长时间的调试。

总的来说，OpenMP 主要是针对细粒度的循环进行并行，编程简单，适合应用于单台独立的计算机，MPI 主要针对粗粒度级别的并行，可操控性更高，能够更好地发挥硬件性能，适合应用于分布式计算机。

2.3 基于 GPU 并行

在 1991 年以前，CPU 是计算机内唯一的通用处理器，包揽了几乎所有的计算任务，当时的操作系统主要是以命令行的形式进行人机交互。从 1991 年到 2001 年，微软公司推出具有图形交互功能的 Windows 操作系统开始在世界市场上流行，极大刺激了图形硬件的发展。随后，S3 Graphics 公司推出全球第一款图形加速器，被视作 GPU 的雏形。

进入 21 世纪后，GPU 产品的性能突飞猛进。以英伟达为代表 GPU 制造商陆续推出支持可编程图形流水线的 GPU 产品，图形流水线是现代 GPU 工作的通用模式，它是以三维场景为输入，输出二维的光栅图像到显示器的一种技术。而可编程图形流水线为编程者提供程序接口 (API) 来实现自定义算法，这是 GPU 通往通用计算领域的一个开端，后来受电脑游戏和三维建模市场需求的驱动，GPU 的计算性能和内存带宽不断提高。自此开始越来越多的开发者开始关注和研究 GPU 在通用计算领域的应用。早期，编程者需要通过调用标准的图形程序接口，如 OpenGL 或 DirectX 来执行计算、存储、通信等操作，因为涉及较多的底层语言，其编码的难度较大并且代码的可移植性差。为此，英伟达公司提出了 CUDA 架构，专为实现 GPU 高性能并行计算而设计。

CUDA 是一个专门为异构并行计算而设计的架构，包括硬件架构 (只限英伟达品牌 GPU) 和指令集。CUDA 相当于一种高级语言，可以兼容 C、C++、Fortran、Java、Python 等高级语言，同时还支持多种应用程序编程接口 (Application Programming Interface, API)，包括 OpenGL、DirectX、OpenCL 等。为了满足人类对计算机信息处理能力越来越高的要求，英伟达公司已经推出多个系列拥有高性能计算能力的 GPU。如图 1所示，近年推出的英伟达 GPU 在浮点数计算能力上已经遥遥领先于同期的 CPU。随着英伟达 GPU 和 CUDA 并行编程模型的不断发展、完善和成熟，CUDA 已经被广泛应用于计算机视觉、人工智能、区块链、计算流体力学等各个领域，并且取得不俗的成绩。

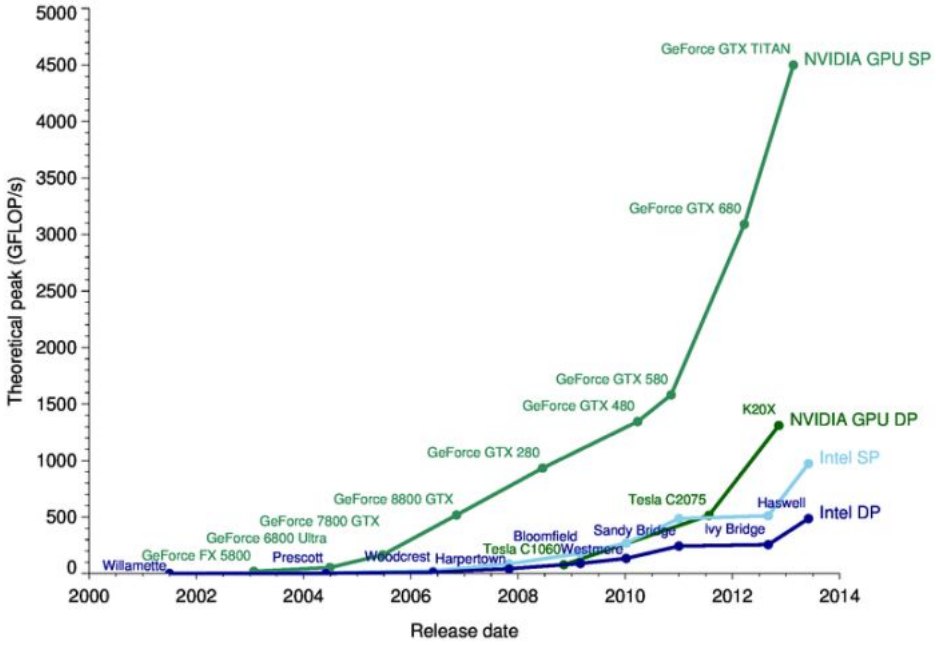


图 1: CPU 和 GPU 单双精度浮点计算能力发展

第三章 实验过程

3.1 问题描述

本问题研究的是简单的圆柱绕流问题，物理示意图如图 2所示。

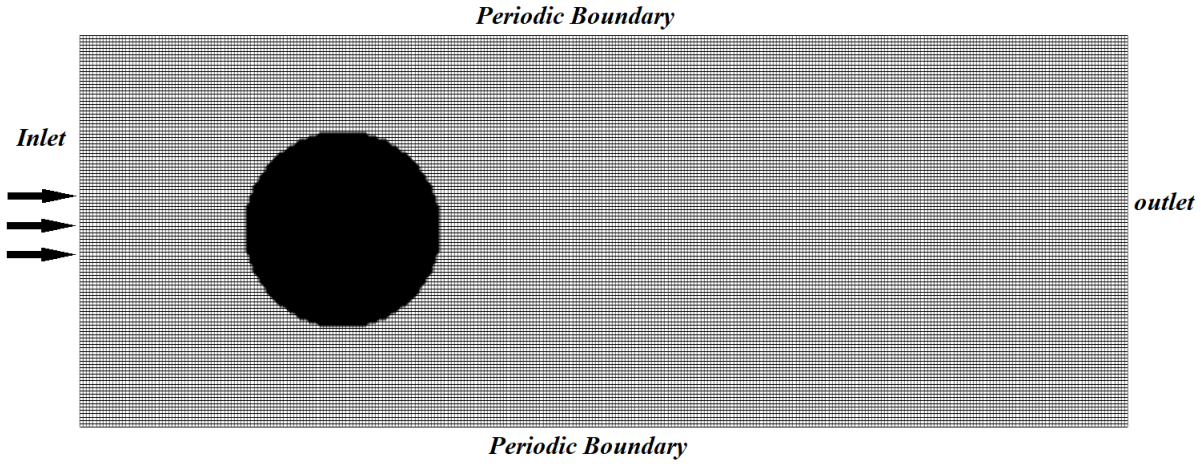


图 2: 计算流场物理示意图

其中计算域的网格 $N_x \times N_y$ 划分为 420×160，圆柱的直径为 80 个网格，圆心的 x 坐标位于 $0.25N_x$ 处，y 坐标位于 $0.5N_y$ 处。对于宏观量，我们给定进口来流速度 $vxin = 0.04$，

密度为 $roout = 1.0$，LBM 松弛时间 $\tau = 0.51$，这是与流体粘性有关的参数。

对于边界条件，上下边界条件我们采用周期边界条件，左侧进口边界条件根据给定的入口速度 $vxin$ 设置为 Zou-He 边界条件，右侧出口边界条件采用简单的外推边界条件，圆柱的固壁边界使用 bounceback 边界条件，具体实现代码在函数 `apply_BCs()` 中。

3.2 实验设备

本文实验平台：操作系统为 Microsoft Windows 10。CPU 为 Intel(R) Core(TM) i5-10500 CPU，主频为 3.10 GHz，六核心十二线程。显卡为 NVIDIA GeForce 1050Ti，显存为 4GB, 显卡的核心频率为 1291-1392MHz，部分参数和 GPU-Z 识别结果如图 3和 4所示。

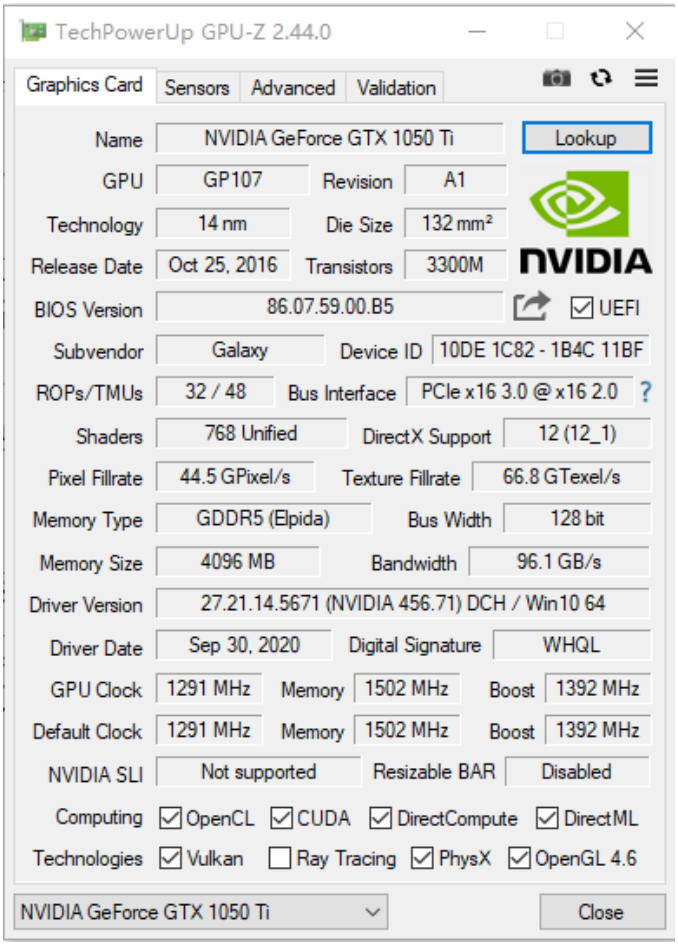


图 3: GPU-Z 设备识别结果

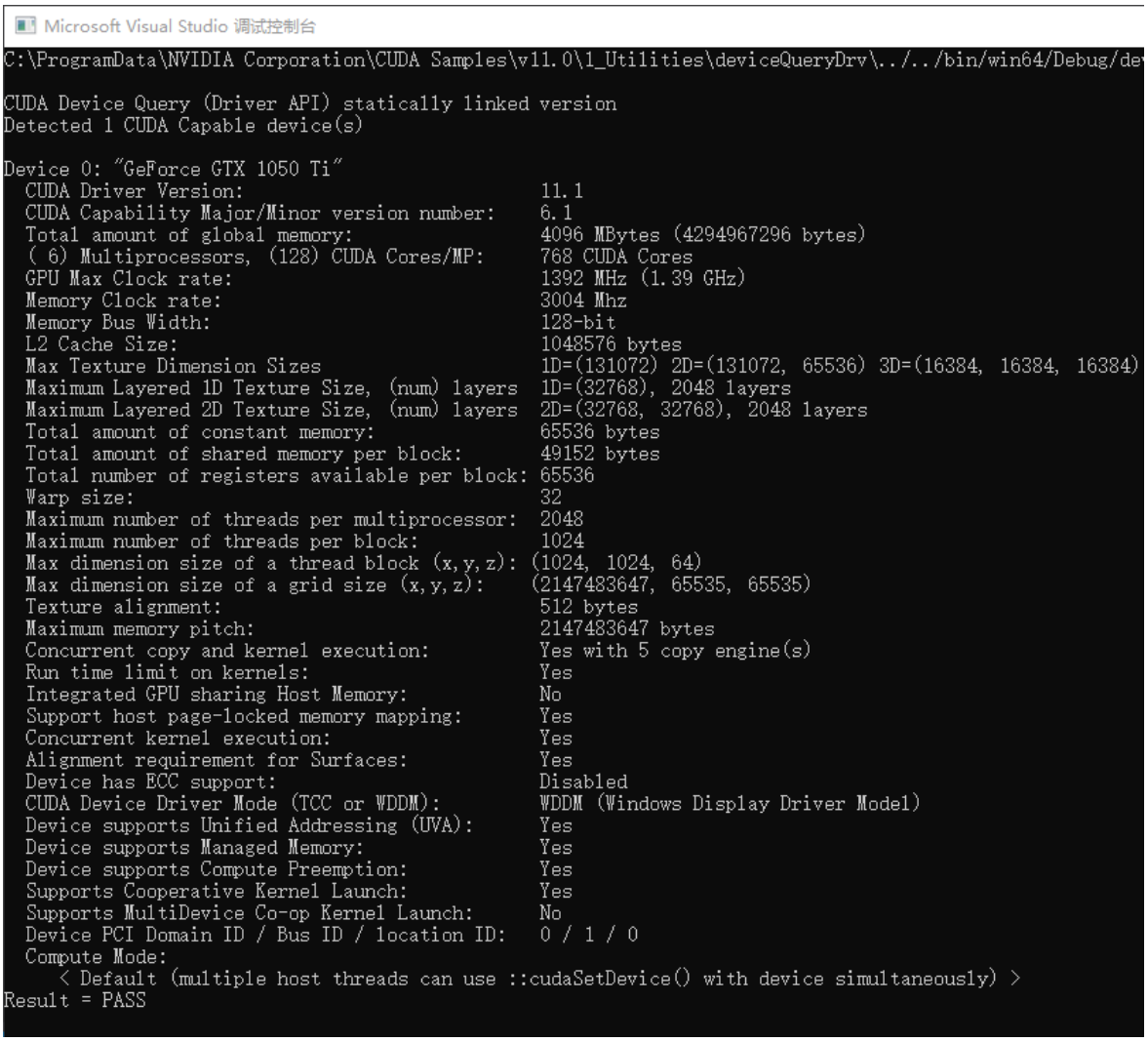


图 4: deviceQuery 运行结果

3.3 数据结构设计

对于 C 语言的串行和 OpenMP 并行程序，我们分配长度为 $N_x \times N_y$ 的十八个一维 float 型数组，用于存储九个分布函数 f0，f1，...，f8 和临时存储的中间数组 tmpf0，tmpf1，...，tmpf8。同时，我们还需要同样长度的两个一维 float 数组 u，v 和一个一维 int 数组 solid，分别用来存储网格点上的两个速度分量以及圆柱固体点的判别标识 (其中 0 代表固体点，1 代表流体点)。

对于 CUDA 程序，我们在 CPU 端上同样先分配九个一维 float 型数组 f0，f1，...，f8，两个一维 float 数组 u，v 和一个一维 int 数组 solid；在 GPU 端上使用 `cudaMallocPitch()` 函数分配对应大小的线性数组 f0_data，f1_data，...，f8_data，和 u_data，v_data，solid_data。`cudaMallocPitch()` 在分配内存时，为保证数组的每一行的第一个元素的开始地址对齐，每行会多分配一些字节，以保证每行的字节是 256 的倍数 (对齐)，这样可以提高读取效

率，示意图如图 5所示。

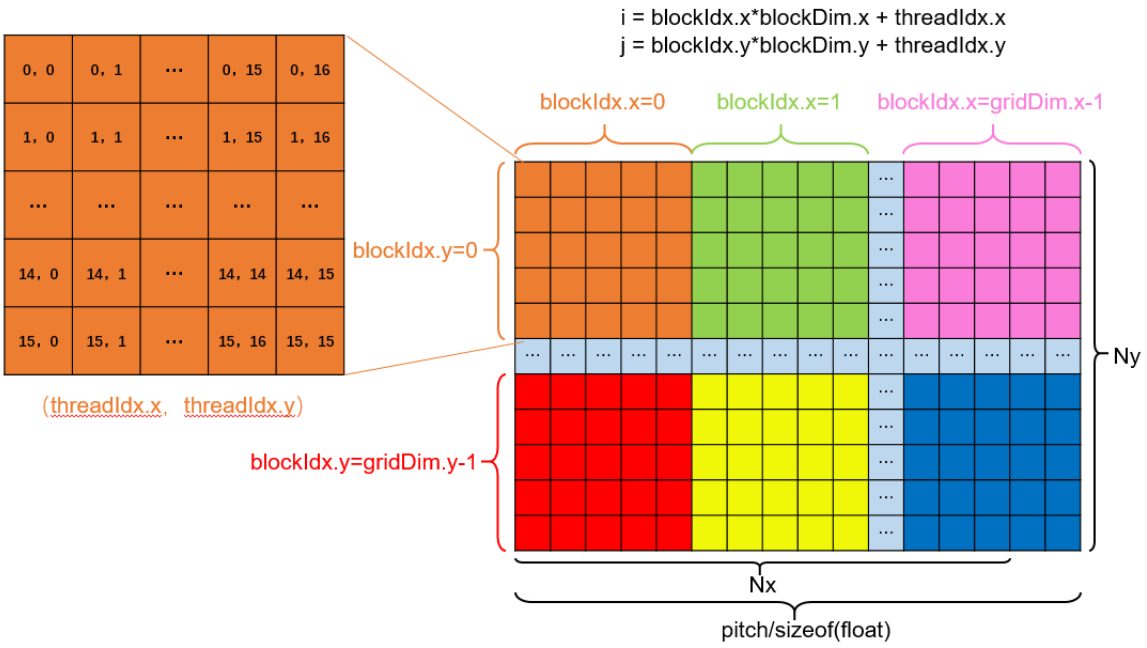


图 5: 流场网格与数组对应逻辑计算结构

因为 0 方向分布函数 f0 并不会实际参与对流步，所以我们使用 `cudaMallocArray()` 仅分配八个 CUDA 数组 f1_array，f2_array，...，f8_array。从 LBM 算法特性可以看出，对流过程每个线程读取位置与邻近线程读取位置非常接近，存在大量的空间局部性，纹理内存非常适用于该算法。我们预先声明八个的 texture<float, 2> 类型的 2D 纹理变量 f1_tex，f2_tex，...，f8_tex，并使用 `cudaBindTextureToArray()` 将 CUDA 数组与纹理内存绑定起来。

需要注意的是，因为纹理内存作为一种只读内存，无法通过写操作更新，在对流步前后需要不断通过 `cudaBindTextureToArray()` 和 `cudaUnbindTexture()` 进行绑定和解绑操作。从而实现整个流程网格点上分布函数的更新迭代。在核函数 `stream_kernel()` 中，我们使用 `tex2D()` 来拾取某个网格点周围点的纹理内存，从而实现对流操作。

3.4 流程计算框图

具体的流程计算框图如下：

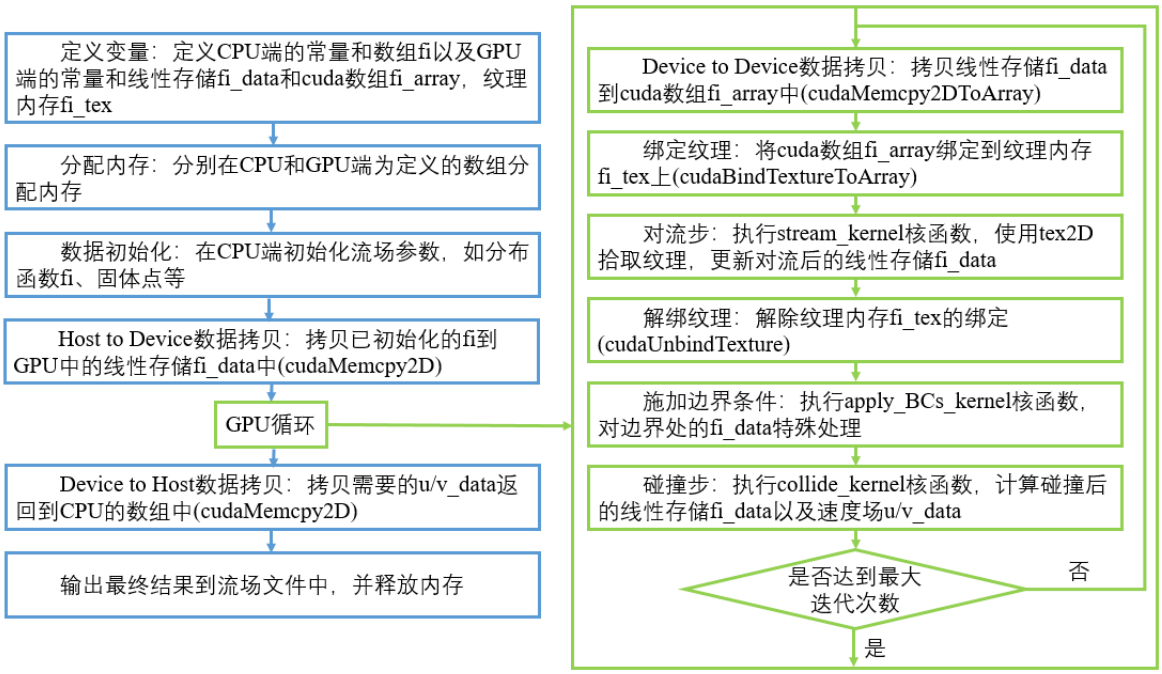
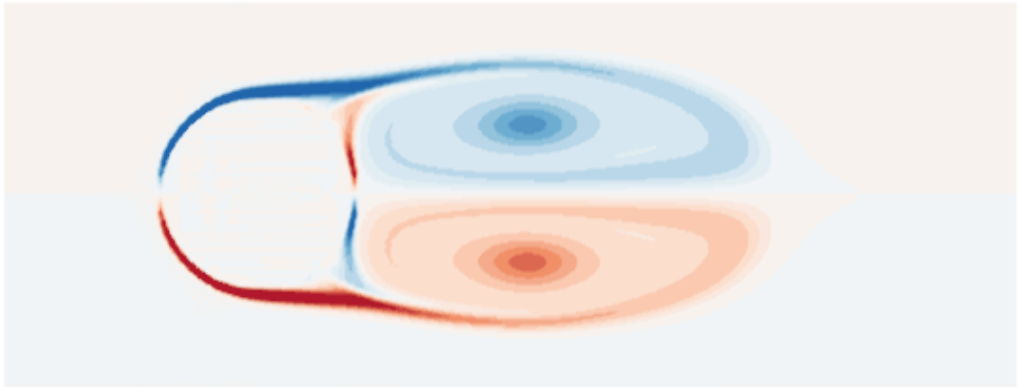


图 6: 流程计算框图

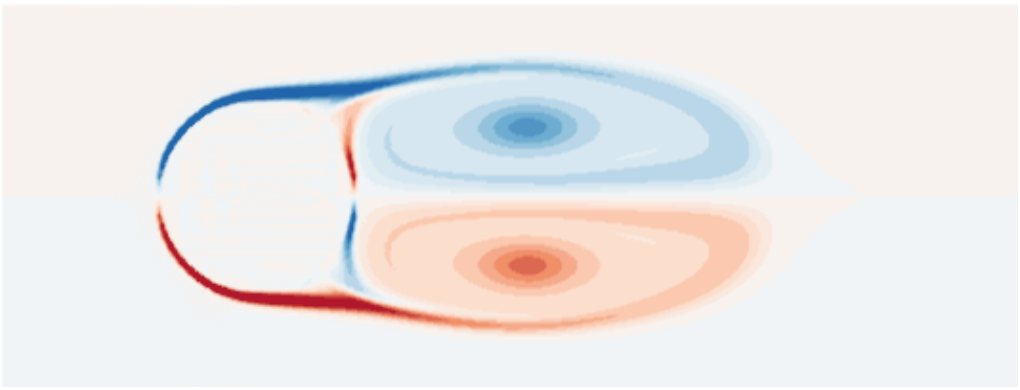
第四章 结论与分析

4.1 流场结果对比

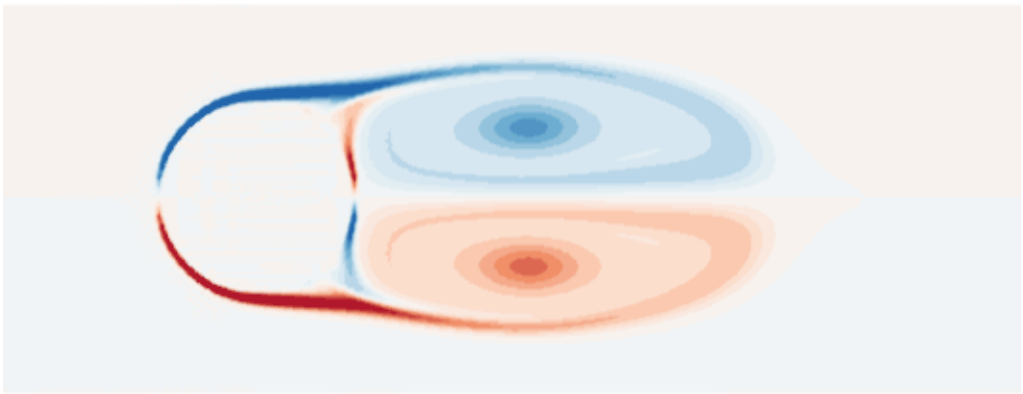
为了验证程序的正确性，我们分别将 `LBM_C.c`，`LBM_OpenMP.c` 和 `LBM_CUDA.c` 三个程序运行 10000 步后的每个网格点的速度分量 u，v 输出到文件 `10000.plt` 中，并使用后处理软件 tecplot 绘制涡量云图进行对比，涡量计算公式为 $vort = \partial v/\partial x - \partial u/\partial y$，可同时验证速度场 u 和 v 的正确性。如图 7所示，三种程序计算结果完全一致，说明三者程序计算正确。



(a) 串行



(b) OpenMP 并行 (四核)



(c) GPU 并行 (block:16 × 16)

图 7: 三种程序计算圆柱绕流的涡量云图

4.2 运行时间对比

如表 1所示是我们程序运行时间的结果。这里我们使用两种计时方法：对于串行和 OpenMP 并行程序，我们采用的是 CPU 时钟，通过 `clock()` 调用并且计算。对于 GPU 程序，因为核函数与 CPU 程序是异步执行的，容易带来各种延迟。相比之下，继续采用 CPU 主机端计时就会不够精确 (CPU 计时仅精确到小数点后三位，GPU 时间计时精确

到小数点后六位)，因而我们选择采用 CUDA 事件计时 API 计算时间，并且能确定 GPU 不同操作的耗时。

为了减小实验中的随机误差，我们尽量关闭其他后台程序，保证在相同的设备环境下多次运行程序，求出最终消耗时间的平均值以及相对于串行程序的加速比。理想情况下，使用 OpenMP 四核并行最后的加速比应该能达到 4.0，但实际操作过程存在任务切换以及调度等时间开销，最终的加速比也只有 3.4 左右。对于 CUDA 并行，可以发现 GPU 加速比能够达到将近 20，远远优于 OpenMP 的加速效果。考虑到实验所使用的 CPU 和 GPU 价格相近，CPU 想达到相同的加速效果需要的成本大得多，这也是近年来超级计算机越来越多使用 GPU 进行加速计算的原因。

表 1: 各程序计算时间对比

	CPU 串行	OpenMP 四核	CUDA (block:16×16)
1	39.960	11.376	2.172047
2	39.934	11.680	2.183745
3	39.998	11.407	2.174925
4	39.984	12.162	2.167604
5	39.935	11.897	2.182287
6	39.939	11.712	2.170362
7	39.925	11.818	2.188568
8	39.928	12.055	2.175561
均值	39.950	11.763	2.176887
加速比	1.000	3.396	18.35206

4.3 参数影响

4.3.1 CPU 并行核数

众所周知，加速比是衡量一个并行算法是否有效的重要指标，但实际应用中往往还要综合考虑并行效率来选择合适的硬件环境。并行效率，即用加速比除以并行核数，值越高的程序表明越充分发挥了处理器的作用。

为了研究 CPU 核数对并行效率的影响，我们通过 `omp_set_num_threads()` 函数改变并行核数，分别研究了 1/2/4/6 核下的并行计算效率，相关结果在表 2和图 8中。如图所示，随着核数增加，加速比也逐渐增加，但并不是呈线性相关性。在六核时加速比只有 3.822，相比四核提升不大。除了程序中存在串行部分外，还因为即使计算机关闭大部分应用程序，依然有一些系统程序占用 CPU 运行，所以并不能完全发挥六核并行的效果。

表 2: 不同 CPU 核数并行程序计算时间对比

	单核	双核	四核	六核
1	39.960	21.372	11.376	10.398
2	39.934	21.473	11.680	10.593
3	39.998	21.410	11.407	10.225
4	39.984	21.259	12.162	10.655
5	39.935	21.223	11.897	10.582
6	39.939	21.335	11.712	10.494
7	39.925	21.219	11.818	9.964
8	39.928	21.295	12.055	10.717
均值	39.950	21.323	11.763	10.454
加速比	1.000	1.874	3.396	3.822
并行效率	1.000	0.93678	0.849042	0.636954

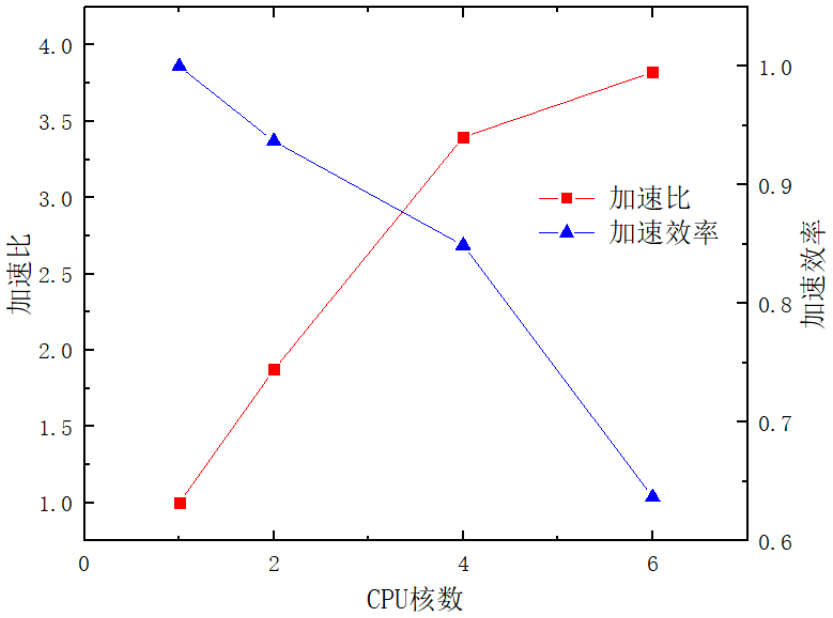


图 8: 不同 CPU 核数并行程序加速比和并行效率对比

4.3.2 GPU 线程块大小

在 CUDA 架构下，执行时的最小单位是 thread，若干个 thread 可以组成一个 block，每一个 block 所能包含的 thread 数目是有限的 (最多 1024 个)，执行相同程序的 block 又可以组成 grid。

但从线程运行的原理来看，block 中的线程数量并不是全部使用完最好，相反在达到一定大小后，一味地增加线程也不会取得性能的提升，反而有可能会让性能下降。线

表 3: 不同 GPU 线程块大小并行程序计算时间对比

线程块大小	8×8	16×16	16×32	32×16	32×32
1	2.260829	2.172047	2.188429	2.219378	2.238027
2	2.255240	2.183745	2.190795	2.217793	2.233487
3	2.254273	2.174925	2.189309	2.217046	2.235491
4	2.258347	2.167604	2.186552	2.229166	2.245697
5	2.258553	2.182287	2.198995	2.217546	2.236075
6	2.275972	2.170362	2.190464	2.218092	2.242517
7	2.278869	2.188568	2.195127	2.221389	2.244022
8	2.275238	2.175561	2.185740	2.216016	2.234186
均值	2.264665	2.176887	2.190676	2.219553	2.238688
加速比	17.640743	18.352063	18.236558	17.999297	17.845443

程数达到隐藏各种延迟的程度后，之后线程数量的提升就并无太大的作用。所以，存在一个最优的 block 大小，使得加速效果最好。

这里，我们分别实验了 block 大小为 8×8，16×16，16×32，32×16，32×32 五种情况，并将计算结果统计在表 3和图 9中。从图中可见，线程块的大小过大或者过小都会让加速效果下降，最优的线程块配置在 16×16 附近。

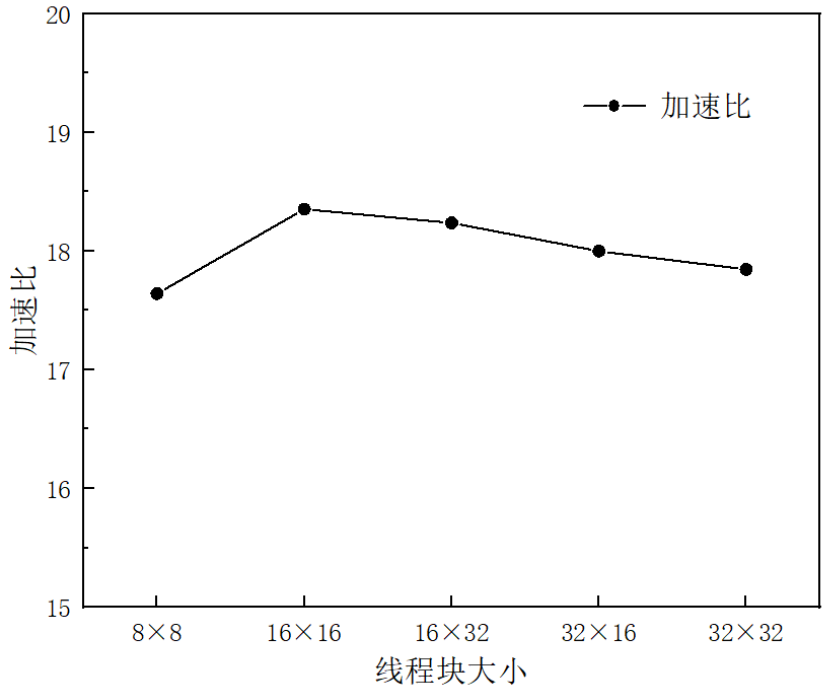


图 9: 不同 GPU 线程块大小并行程序加速比对比

第五章 心得体会

通过完成本次 GPU 并行计算的大作业，我回顾了所学的有关 C 语言的相关理论，同时也再次加深对 LBM 算法实现的理解。

首先是对这次实验的一些经验性的总结：(1) 对于 CUDA 的安装，一定要选择适配自己的显卡版本，且对于这种底层的语言安装最好安装在 C 盘，否则在设置环境变量以及调用库函数时，经常会找不到路径；(2) 程序对比实验时，一定要保证属性设置完全一致，Release 版本的程序相比 Debug 版本也有很大的速度优化，除此以外 O1/O2/O3 优化也会对程序速度产生很大影响。(3) 对于线程块的大小，并不是越大越好，存在最优的配置，需要靠自行实验得出。

作为计算流体力学专业的学生，事实上本课题组使用的很多 Fortran 代码都使用了并行计算的方法，包括 MPI 或者 OpenMP 并行。CUDA 作为一种新兴的并行架构，对于加速流体力学计算有很广泛的前景。这次模拟的问题只是流体力学中很简单的问题，实际问题计算中往往还涉及到复杂的流固耦合问题等等，这对于如何使用 CUDA 实现还需要重新设计程序结构。

最后，要感谢老师上课的讲解，虽然之前一直在使用课题组相关并行代码，但对并行计算的内容了解甚少。同时也要感谢同学的建议，在代码 debug 的方法对我的启发很大，才能顺利完成本次大作业。