Имплементация на МКЕ за решаване на уравненията на Навие-Стокс за графични процесори

Защита на дипломна работа

МП „Изчислителна математика и математическо моделиране“

Дипломант: Васил Пашов, ФН 25938

Научен ръководител: гл. ас. д-р Тихомир Иванов

30 ноември 2021г.

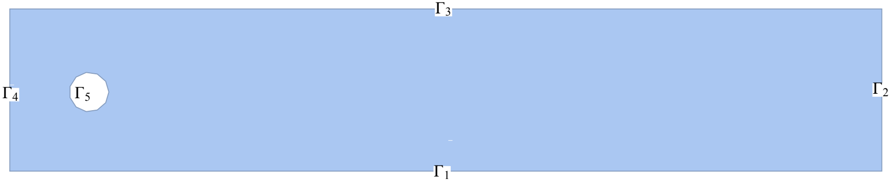
Уравнения на Навие-Стокс

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \nabla p(\mathbf{x}, t) - \nu \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0$$

- $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ е скоростта
- $p \in \mathbb{R}$ е налягането
- ν е вискозитет
- $\mathbf{f}$ е съвкупност от обемни сили, напр. гравитация

Моделна задача (2D DFG Benchmark)



Гранични условия:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{u} &= 0, && (\mathbf{x}, t) \in (\Gamma_1 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_5) \times J \\
\mathbf{u} &= \left(\frac{1.2y\,(0.41 - y)}{0.41^2}, 0 \right), && (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_4 \times J \\
\nu \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} - p\mathbf{n} &= 0, && (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_2 \times J
\end{aligned}
$$

Дефинираме $\Gamma_D = \Gamma_1 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4 \cup \Gamma_5$

Дискретизация по времето

Основно уравнение

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x},t)}{\partial t} + (\mathbf{u}(\mathbf{x},t)\cdot\nabla)\,\mathbf{u}(\mathbf{x},t) + \nabla p(\mathbf{x},t) - \nu\Delta\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = 0$$

Дискретизиране по времето

$$\frac{\mathbf{u}^{i+1}-\mathbf{u}^{i}}{\Delta t} + \mathbf{u}^{i}\cdot\nabla\mathbf{u}^{i} + \nabla p^{i} - \nu\Delta\mathbf{u}^{i} = 0$$

$$\frac{\mathbf{u}^{i+1}+\mathbf{u}^{A}-\mathbf{u}^{A}+\mathbf{u}^{B}-\mathbf{u}^{B}-\mathbf{u}^{i}}{\Delta t} + \mathbf{u}^{i}\cdot\nabla\mathbf{u}^{i} + \nabla p^{i} - \nu\Delta\mathbf{u}^{i} = 0$$

Разделяне на оператора

$$\frac{\mathbf{u}^{A}-\mathbf{u}^{i}}{\Delta t} + \mathbf{u}^{i}\cdot\nabla\mathbf{u}^{i} = 0$$

Адвекция

$$\frac{\mathbf{u}^{B}-\mathbf{u}^{A}}{\Delta t} = \nu\Delta\mathbf{u}^{B}$$

Дифузия

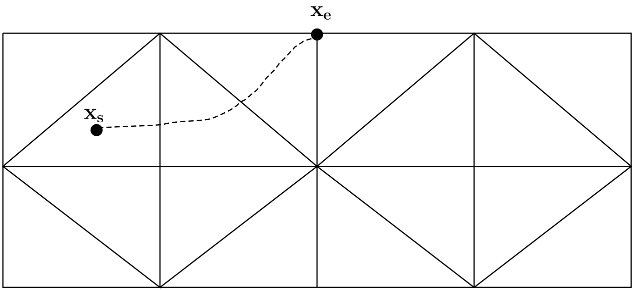
$$\frac{\mathbf{u}^{i+1}-\mathbf{u}^{B}}{\Delta t} = -\nabla p^{i}$$

Уравнение на Поасон за налягането (след прилагане на $\nabla\cdot$ върху двете страни)

Адвекция – полу-Лагранжев метод

Уравнение на адвекцията. Търсим скоростта в точка $\mathbf{x}_e$ в момент от време $t + \Delta t$.

$$\frac{\mathbf{u}^A - \mathbf{u}^i}{\Delta t} + \mathbf{u}^i \cdot \nabla \mathbf{u}^i = 0$$



$$\mathbf{x}_s = \mathbf{x}_e - \Delta t \mathbf{u}(\mathbf{x}_e, t)$$

Дифузия – слаба формулировка

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathbf{u}^B - \mathbf{u}^A}{\Delta t} &= \nu \Delta \mathbf{u}^B, && (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times J \\
\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}^B &= 0, && (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_2 \times J \\
\mathbf{u}^B &= 0, && (\mathbf{x}, t) \in (\Gamma_1 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_5) \times J \\
\mathbf{u}^B &= \mathbf{u}_{\Gamma_4}, && (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_4 \times J
\end{aligned}
$$

Тестово пространство: $\mathbf{v} \in V : \left\{ \mathbf{v} \in H^1 : \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)|_{\Gamma_D} = 0 \right\}$
Търсим $\mathbf{u} \in U : \left\{ \mathbf{v} \in H^1 : \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)|_{\Gamma_1 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_5} = 0 \right\}$, такова че:

$$
\left(\frac{\mathbf{u}^B - \mathbf{u}^A}{\Delta t}, \mathbf{v} \right) = \left(\nu \Delta \mathbf{u}^B, \mathbf{v} \right), \forall \mathbf{v} \in V
$$

Дифузия – МКЕ

$$\left(\mathbf{u}^B, \mathbf{v}\right) = \left(\mathbf{u}^A, \mathbf{v}\right) - \Delta t \nu \left(\nabla \mathbf{u}^B : \nabla \mathbf{v}\right), \forall \mathbf{v} \in V$$

$$\left(\mathbf{u}^B, \mathbf{v}\right) + \Delta t \nu \left(\nabla \mathbf{u}^B : \nabla \mathbf{v}\right) = \left(\mathbf{u}^A, \mathbf{v}\right), \forall \mathbf{v} \in V$$

Търсим приближеното решение: $\mathbf{u}_h = \sum_{i=1}^{2N_v} \mathbf{\Phi}_i q_i \in U_h$

$$\left(\begin{bmatrix} \mathsf{M} & 0 \\ 0 & \mathsf{M} \end{bmatrix} + \nu \Delta t \begin{bmatrix} \mathsf{K} & 0 \\ 0 & \mathsf{K} \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^B \\ \mathbf{Q}_2^B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathsf{M} & 0 \\ 0 & \mathsf{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^A \\ \mathbf{Q}_2^A \end{bmatrix}$$

Налягане – слаба формулировка

Основно уравнение:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathbf{u}^{i+1} - \mathbf{u}^{B}}{\Delta t} = -\nabla p^{i}, && (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times J \\
&\mathbf{n} \cdot \nabla p^{i} = 0, && (\mathbf{x}, t) \in (\Gamma_1 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4 \cup \Gamma_5) \times J \\
&p^{i} = 0, && (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_2 \times J
\end{aligned}
$$

Използваме $\nabla \cdot \mathbf{u}^{i+1} = 0$ и вземаме дивергенцията на двете страни:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{B} = \Delta p^{i} \Delta t$$

Умножаваме двете страни с функция от тестовото пространство: $q \in Q : \left\{ q \in H^1 : q|_{\Gamma_2} = 0 \right\}$. Решението търсим в пространството Q.

$$\left(\nabla \cdot \mathbf{u}^{B}, q \right) = -\Delta t \left(\nabla p^{i}, \nabla q \right), \forall q \in Q$$

Налягане – МКЕ

Търсим приближеното решение за налягането $p_h = \sum_{i=1}^{N_p} \chi_i p_i \in Q_h$

$$\begin{bmatrix} \mathrm{M} & 0 \\ 0 & \mathrm{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^{i+1} \\ \mathbf{Q}_2^{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{M} & 0 \\ 0 & \mathrm{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^{B} \\ \mathbf{Q}_2^{B} \end{bmatrix} - \Delta t \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{p,1} \\ \mathbf{B}_{p,2} \end{bmatrix} \mathbf{P}^i$$

Намиране на $\mathbf{u}^{i+1}$ – Слаба формулировка

Основно уравнение:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathbf{u}^{i+1} - \mathbf{u}^B}{\Delta t} = -\nabla p^i, && (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times J \\
&\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}^i = 0, && (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_2 \times J \\
&\mathbf{u}^i = 0, && (\mathbf{x}, t) \in (\Gamma_1 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_5) \times J \\
&\mathbf{u}^i = \mathbf{u}_{\Gamma_4}, && (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_4 \times J
\end{aligned}
$$

Тестово пространство: $\mathbf{v} \in V : \left\{\mathbf{v} \in H^1 : \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)|_{\Gamma_D} = 0\right\}$.
Търсим $\mathbf{u} \in U : \left\{\mathbf{v} \in H^1 : \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)|_{\Gamma_1 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_5} = 0\right\}$, такова че:

$$
\left(\mathbf{u}^{i+1}, \mathbf{v}\right) = \left(\mathbf{u}^B, \mathbf{v}\right) - \Delta t \left(\mathbf{v}, \nabla p^i\right)
$$

Намиране на $\mathbf{u}^{i+1}$ – МКЕ

Търсим приближеното решение: $\mathbf{u}_h = \sum_{i=1}^{2N_v} \mathbf{\Phi}_i q_i \in U_h$

$$\begin{bmatrix} \mathrm{M} & 0 \\ 0 & \mathrm{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^{i+1} \\ \mathbf{Q}_2^{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{M} & 0 \\ 0 & \mathrm{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^{B} \\ \mathbf{Q}_2^{B} \end{bmatrix} - \Delta t \begin{bmatrix} \mathrm{B}_{p,1} \\ \mathrm{B}_{p,2} \end{bmatrix} \mathrm{P}^i$$

Време за изпълнение за ламинарен поток ($Re = 20$) – CPU

	Компютър 2 – 1 нишка						
	Адвекция	Дифузия	Намиране на налягането	Намиране на $\mathbf{u}^{i+1}$	СГ (Общо)	Асемблиране	Общо Време
Средно време	60.32s	101.12s	398.50s	30.31s	529.93s	11.82s	605.48s

	Компютър 2 – 8 нишки						
	Адвекция	Дифузия	Намиране на налягането	Намиране на $\mathbf{u}^{i+1}$	СГ (Общо)	Асемблиране	Общо Време
Средно Време	9.21s	26.31s	75.57s	8.29s	110.17s	3.72s	124.40s

Асемблиране на глобалните матрици – CPU

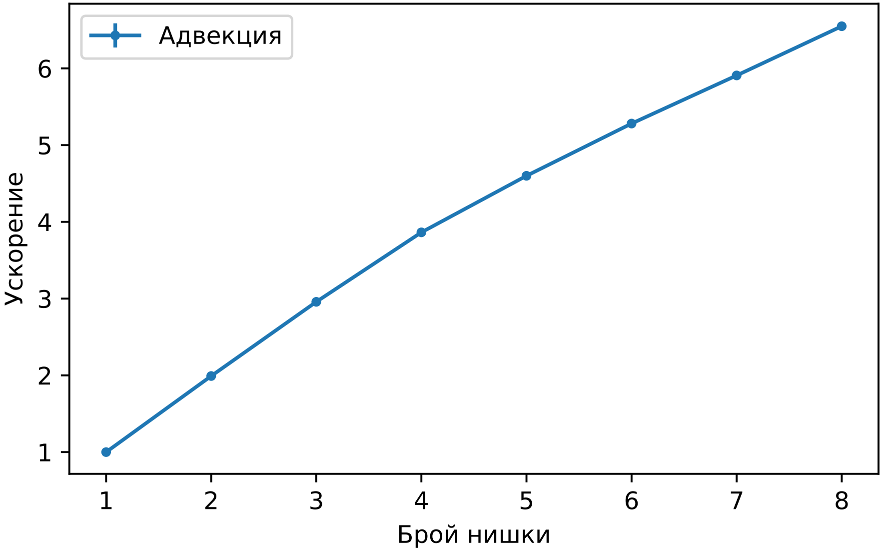
- CSR формата налага зависимост между данните
- Матриците са константни
- Всяка матрица се пресмята на отделна нишка

Адвекция – Паралелна имплементация

Задачата е тривиална.

- Разделяме възлите на m групи
- Всяка нишка може независимо да намери скоростите за възлите от своята група

Адвекция – паралелна имплементация, ламинарен поток



Метод на спрегнатия градиент – CPU

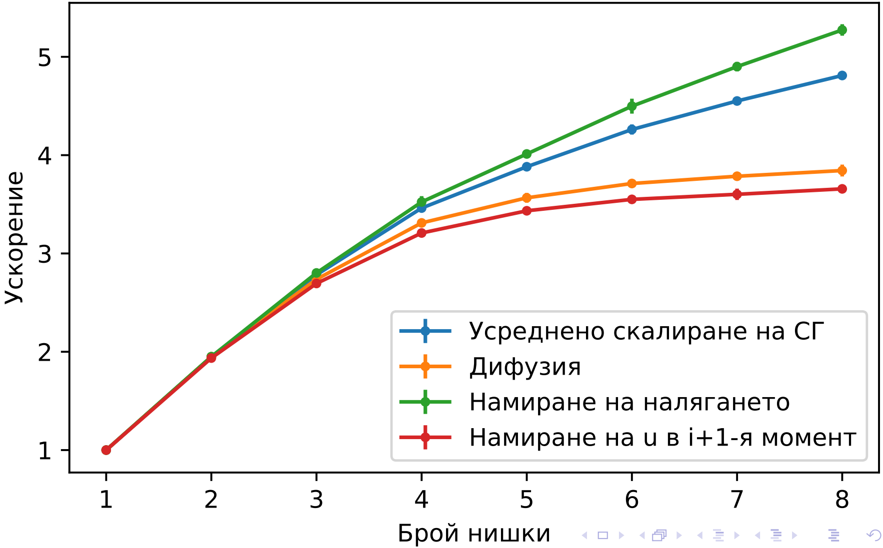
- Нужни са синхронизационни примитиви
- Всяка част от една стъпка е тривиална за паралелна имплементация

Метод на спрегнатия градиент – алгоритъм

Алгоритъм 1 Метод на спрегнатия градиент за решаване на $Ax = b$ с начално приближение x_0

procedure $\mathrm{CG}(A, b, x_0)$
    $r_0 \leftarrow b - Ax_0$
    $p_0 \leftarrow r_0$
    for $j \leftarrow 0, 1, \dots$ until convergence **do**
        $ap \leftarrow Ap_j$
        $\alpha_j \leftarrow \frac{(r_j, r_j)}{(ap, p_j)}$
        $x_{j+1} \leftarrow x_j + \alpha_j p_j$
        $r_{j+1} \leftarrow r_j - \alpha_j ap$
        $\beta_j \leftarrow \frac{(r_{j+1}, r_{j+1})}{(r_j, r_j)}$
        $p_{j+1} \leftarrow r_{j+1} + \beta_j p_j$
    return x_{j+1}

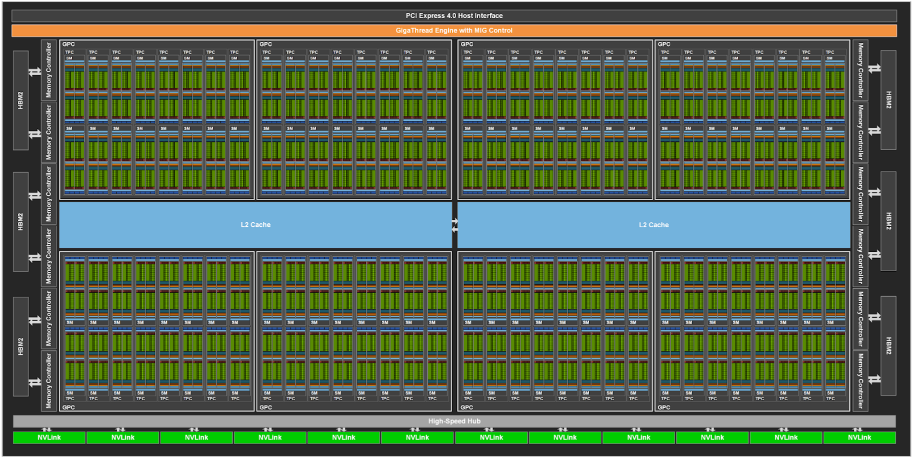
Метод на спрегнатия градиент – паралелна имплементация, ламинарен поток ($Re = 20$)



GPU архитектура – Streaming Multiprocessor

- 64 CUDA ядра
- Warp, active warp
- Условни оператори

GPU Цялостна архитектура



Програмен модел

- Kernel
- Grid (2D/3D)
- Thread block (до 1024 нишки).
- Препоръчително е в един grid да има повече блокове отколкото SM
- Пример – събиране на два вектора

$$\begin{array}{cccc} a_0 & a_1 & \ldots & a_n \\ & & + & \\ b_0 & b_1 & \ldots & b_n \end{array}$$

GPU – Адвекция

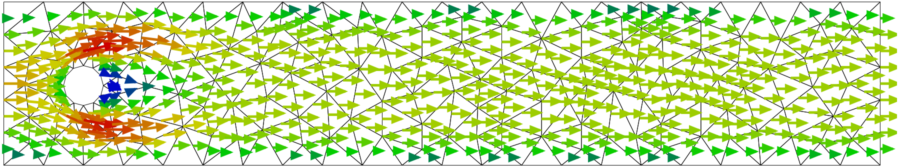
- Пасва идеално на програмния модел

Метод на спрегнатия градиент – Mega kernel подход

- Сравнение с multi kernel подход
- Целият метод е един kernel
- Изисква синхронизация

Време за изпълнение за ламинарен поток ($Re = 20$) – GPU

	GPU Mega Kernel подход						
	Адвекция	Дифузия	Намиране на налягането	Намиране на $\mathbf{u}^{i+1}$	СГ (Общо)	Асемблиране	Общо Време
Средно време	0.54s	2.98s	8.19s	1.26s	12.44s	4.02s	18.24s



Заключение

- Представени са 3 метода за решаване на уравненията на Navier-Stokes
- Разделянето на диференциалния оператор по времето на 3 части пасва най-добре на зададените цели
- Полу-Лагранжевият метод за адвекция е подходящ за паралелна имплементация
- Ускорението от паралелна имплементация на метода на спрегнатия градиент се усеща най-добре за големи матрици и уравнения с много итерации

Насоки за развитие

- Експерименти с други видове елементи
- Разделяне на оператора с по-голяма точност, напр. разделяне на Странг
- Апроксимация по времето с по-голяма точност, напр. методи на Рунге-Кута
- Използване на "многоетапен" полу-Лагранжев метод
- Паралелно асемблиране на глобалните матрици
- Паралелна имплементация на пресмятането и прилагането на IC0
- Разглеждане на други преобуславящи методи, напр. блочно пребуславяне на Якоби

Благодаря за вниманието!