Parabolikus egyenletrendszerek megoldása GPU-val

Elsőrendű fázisátalakulások dinamikája

Tóth Gyula

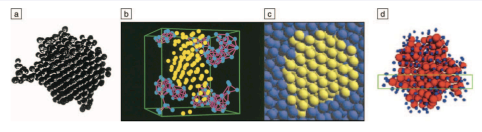
MTA SZFKI

MTA RMKI, Budapest, 2010. június 4.

Tartalom

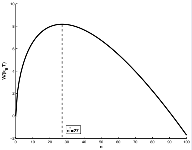
Nukleáció

Heterofázisú fluktuációk



Heterofázisú fluktuáció = kristályos mag + felület

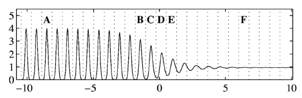
Képződési energia



Klasszikus (éles határ) leírás

- Energia: $W(r) = -\Delta tpV + \gamma A$
- Δtp: hajtóerő (térfogati járulék)
- γ: felületi szabadenergia (felületi járulék)

Diffúz határréteg (MD)



A kontinuum modellek szükségessége

Az emberi (kísérletileg vizsgálható) időskálán zajló nukleációs jelenségek esetében a nukleusz mérete néhány 10 - néhány 100 atom ⇒ az egész nukleusz csak határréteg!

Kontinuum modellek

Rendparaméterek

- Struktúrális: $\phi(\mathbf{r}, t) \in [0, 1]$, $\phi = 0$ a folyadék, $\phi = 1$ a szilárd állapot
- Egyéb: pl. koncentráció $[c(\mathbf{r}, t)]$, sűrűség $[\rho(\mathbf{r}, t)]$

(Nemlokális) szabadenergia funkcionál

Egykomponensű fázismező-elmélet: $F = \int dV \left\{ \frac{\epsilon^2}{2} (\nabla\phi)^2 + f(\phi) \right\}$

- $f(\phi) = ag(\phi) + p(\phi)\Delta f$ lokális szabadenergia-sűrűség
  - $p(\phi)$: interpolál $p(0) = 0$ és $p(1) = 1$ között - termodinamikai hajtóerő
  - $g(\phi)$: kétfenekű görbe, minimuma van $\phi = 0, 1$-nél - termodinamikai gát
- $(\nabla\phi)^2$: A ϕ *változását* bünteti $\Rightarrow$ diffúz határfelület

A rendparaméter mozgásegyenlete

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = M \left(\epsilon^2 \nabla^2 \phi - \frac{\partial f}{\partial\phi} \right) + \zeta_\phi$$

A dinamikai egyenletek matematikai szemmel

Nemlineáris parabolikus differenciálegyenlet: $\hat{D}[\phi] = f(\phi)$

- $\hat{D} = \frac{\partial}{\partial t} - \nabla^2$ időben első, térben másodrendű differenciáloperátor
- $f(\phi)$ általános nemlineáris függvény

Tulajdonságok

- diffúziós egyenlet *szerű* - pl. hővezetés
- a nemlinearitás miatt analitikus megoldás általában nem ismert (vagy nincs is)

Numerikus megoldás

1. A számítási tartomány definiálása (Γ)
2. Az egyenlet diszkretizálása: $\phi(\mathbf{r}, t) \to \phi_i^n$, $\hat{D} \to D_i^n$.
3. A kezdőérték megadása: ϕ_i^0, $i \in \Gamma$
4. a diszkretizált egyenlet hajtása: $\phi_i^n \to \phi_i^{n+1}$

Diszkretizált téroperátorok

Taylor sorfejtés

$$\phi(\mathbf{r}_0 + \Delta t\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}_0) + \nabla\phi(\mathbf{r}_0)\Delta t\mathbf{r} + \frac{1}{2}\Delta t\mathbf{r}\mathbf{D}(\mathbf{r}_0)\Delta t\mathbf{r} + O(\Delta t r^3),\ \text{ahol}\ D_{ij} = \frac{\partial^2\phi}{\partial r_i \partial r_j}$$

Diszkretizált téroperátorok (példák)

- 1D uniform háló (σ):
  - $\phi(x_i + \sigma) - \phi(x_i - \sigma) = 2\sigma\frac{\partial\phi}{\partial x}(x_i) + O(\sigma^3) \Rightarrow \frac{\partial\phi}{\partial x}(x_i) \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\sigma}$
  - $\phi(x_i + \sigma) + \phi(x_i - \sigma) - 2\phi(x_i) = \sigma^2\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}(x_i) + O(\sigma^4) \Rightarrow \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}(x_i) \approx \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\sigma^2}$
- 2D uniform háló (σ):
  - $\nabla^2\phi(\mathbf{r_i}) \approx \frac{\phi_{(i+1,j)} + \phi_{(i-1,j)} + \phi_{(i,j+1)} + \phi_{(i,j-1)} - 4\phi_{(i,j)}}{\sigma^2}$
- Más lehetőségek: Uniform 2D háromszög és 3D tetraéder hálók, adaptív hálók,...

Lineáris parabolikus időléptetési sémák

A megoldandó egyenlet: $\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \phi$.

Euler módszer

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \frac{\Delta t}{\sigma^2}\left(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n\right)$$

- Időderivált diszkretizációja: $\frac{\partial \phi}{\partial t}(x_i, t_n) \approx \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t}$
- A térbeli differenciáloperátor diszkretizációja: $\nabla^2 \phi(x_i, t_n) \approx \frac{\phi_{i+1}^n + \phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n}{\sigma^2}$

Dufort-Frankel módszer

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^{n-1} + \frac{2\Delta t}{\sigma^2}\left[\phi_{i+1}^n - (\phi_i^{n+1} + \phi_i^{n-1}) + \phi_{i-1}^n\right]$$

- Időderivált diszkretizációja: $\frac{\partial \phi}{\partial t}(x_i, t_n) \approx \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t}$
- Vegyes téroperátor séma!

Crank-Nicholson módszer

Időben implicit, másodrendű séma, ami **mátrixegyenlet**re vezet! $\Rightarrow$ nehézkes kezelés

Stabilitási kritérium, skálázódás

- *Pontosság:* diszkretizálás $\Rightarrow$ differenciálegyenlet $\leftrightarrow$ differenciaegyenlet
- *Stabilitás:* Az időléptetés holgyan propagálja a kerekítési hibát

von Neumann stabilitásanalízis

$\phi_i^n = (\phi_i^n)^* + u^n \exp(ikx_i)$ síkhullám terjedése; $(\phi_i^n)^*$ a differenciaegyenlet megoldása.
$\Rightarrow u^{n+1} = gu^n \Rightarrow |g| < 1$ minden k-ra $\Rightarrow$ stabil formula.

- Euler-módszer: $\Delta t < c\sigma^2$
- Dufort-Frankel: feltétel nélkül stabil, de **nem konvergens** $\sigma \to 0$ esetén

Skálázódás, számításigény, problémák

- Euler-módszer: kétszeres térbeli felbontás $\Rightarrow 4 \cdot 2^D$-szeres számításigény
- σ és Δt növekedésével romló pontosság
- nemlineáris tagok $\Rightarrow$ lineáris stabilitási analízis (von Neumann)

A Fourier-transzformáció

Spektrális megközelítés

$$\phi(\mathbf{r},t) \sim \int d\mathbf{k}\phi_{\mathbf{k}}(t)\exp(-i\mathbf{kr}) \Rightarrow \frac{\partial\phi}{\partial t} = \nabla^2\phi \leftrightarrow \frac{\partial\phi_{\mathbf{k}}}{\partial t} = -\mathbf{k}^2\phi_{\mathbf{k}} \Rightarrow \phi_{\mathbf{k}}(t)$$

Lineáris egyenletre analitikus megoldás ($\omega_{\mathbf{k}}$ diszperziós reláción keresztül)

Nemlineáris egyenletek

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \nabla^2\phi + f(\phi) \Rightarrow \frac{\partial\phi_{\mathbf{k}}}{\partial t} = -\mathbf{k}^2\phi_{\mathbf{k}} + f_{\mathbf{k}}, \text{ ahol } f[\phi(\mathbf{r},t)] \sim \int d\mathbf{k} f_{\mathbf{k}}(t)\exp(-i\mathbf{kr})$$

$f(\phi)$ nemlineáris ϕ-ben, $f_{\mathbf{k}}$ nem fejezhető ki $\phi_{\mathbf{k}} - val$ $\Rightarrow$ Nincs analitikus megoldás!

Numerikus megoldás

- A nemlinearitást megfelelő kezelésével a spektrumban diszkretizálhatunk
- A téroperátorok a spektrumban pontfüggvények (ráadásul pontosabbak)!
- Feltétel nélkül stabil, konvergens sémák!

A spektrális egyenletek

Diszkretizálás **k**-térben

$\frac{\partial \phi_{\mathbf{k}}(t)}{\partial t} = -\mathbf{k}^2 \phi_{\mathbf{k}}(t) + f_{\mathbf{k}}(t)$, ahol $f_{\mathbf{k}}(t) = \mathscr{F}[f(\mathscr{F}^{-1}[\phi_{\mathbf{k}}(t)])]$

- Diszkrét hullámszámokon oldjuk meg az egyenletet: $\mathscr{F} \rightarrow DFT$
  $\Rightarrow$ Nincs szükség térbeli véges differenciasémákra
- Feltétel nélkül stabil, konvergens időléptetés:
  $\left(1 + \Delta t\mathbf{k}^2\right) \phi_{\mathbf{k}}^{n+1} = \phi_{\mathbf{k}}^n + \Delta t f_{\mathbf{k}}^n \Rightarrow \phi_{\mathbf{k}}^{n+1} = \frac{\phi_{\mathbf{k}}^n + \Delta t f_{\mathbf{k}}^n}{\left(1+\Delta t\mathbf{k}^2\right)}$

Implementáció

1. Kezdetiérték: ϕ_i^0 Γ (uniform) rácson $\Rightarrow \tilde{\phi}_k^0 = DFT[\phi_i^n]$ $\tilde{\Gamma}$-n
2. Nemlineáris tag: $\phi_i^n = iDFT[\tilde{\phi}_k^n] \rightarrow f_i^n = f(\phi_i^n) \rightarrow \tilde{f}_k^n = DFT[f_i^n]$
3. Időléptetés: $\tilde{\phi}_k^{n+1} = \left(\tilde{\phi}_k^n + \Delta t \tilde{f}_k^n\right) / \left(1 + \Delta t\mathbf{k}^2\right)$ (PONTFÜGGVÉNY)
4. Vissza 2-re.

Térbeli információ (1D): $k = \frac{2\pi}{\sigma} \frac{j}{N}$, $j = 0 \ldots N-1$ ($\mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$).

Párhuzamosítás GPU-ra

Implementáció

- Feladat: iDFT → PF → DFT → iPF
  DFT: Diszkrét Fourier Transzformáció
  PF: Pontfüggvény kiértéklés
- DFT: **cuFFT** beépített könyvtár
- PF: saját kernel (igen egyszerű)
  Computational grid felépítése:

  $N = 2^{NX} \times 2^{NY} \times 2^{NZ}$ térbeli háló
  (cuFFT ilyenkor hatékony)

  $THREADS = 2^{NT}(512)$

  dim3 threads(THREADS);
  dim3 grid(N/THREADS);

  Ha $2^{NX+NY+NZ-NT}$ túl nagy, 2D háló is indítható (65535x65535x1)

Térbeli véges differencia

- téroperátor $\rightarrow$ véges differencia séma (pontatlanság)
- Időléptetés: explicit v. implicit
- Euler: stabil, ha $\Delta t < c\sigma^2 \Rightarrow$ magas számítási idő igény (8x,16x,32x)
- Dufort-Frankel: feltétel nélkül stabil, de nem konvergens $\sigma \rightarrow 0$ esetén!
- Crank-Nicholson: időben másodrendű implicit $\Rightarrow$ nagy mátrixegyenletek
- Hogyan kezeljük a nemlinearitást? (von Neumann)
- GPU párhuzamosítás: Kommunikációigény a tartományok között - bonyolult, lassú

Spektrális

- téroperátor $\rightarrow$ pontfüggvény (iPF)
- Nemlineáris rész kezelése: $iDFT \rightarrow PF \rightarrow DFT$
- beépített cuFFT könyvtár használata
- Pontfüggvények, diszkrét valós és k-térben $\Rightarrow$ Nincs szükség a tartományok között kommunikációra $\Rightarrow$ egyszerű parallel implementáció
- feltétel nélkül stabil és konvergens implicit időléptetés $\Rightarrow$ A számítási időigény 2-3 NAGYSÁGRENDDEL csökkenhet!
- pontosabb
- Anti-aliasing...

Fizikai feladatok

Kontinuum modellek

- Egykomponensű fázismező modell: $\partial_t \phi = \nabla^2 \phi + f(\phi)$
- Fázisszeparáció Cahn-Hilliard folyadékban: $\partial_t c = \nabla^2 \left[f(c) - \nabla^2 c \right]$
- Standard kétkomponensű fázismező modell:
  $\Delta\Omega = \int dV \left\{ \frac{\epsilon_\phi^2}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{\epsilon_c^2}{2} (\nabla c)^2 + \Delta\omega(\phi, c) \right\}$
  ($c = 0, 1$-re egykomponensű limit)

  $\partial_t \phi = \nabla^2 \phi + f(\phi, c)$
  $\tau \partial_t c = \nabla^2 [g(\phi, c) - \nabla^2 c]$
- Eutektikus megszilárdulás Multi Phase-Field modellje:
  $\mathcal{F} = \int dV \left\{ \frac{1}{2} \sum_i (\nabla\phi_i)^2 + \Delta f(\{\phi\}, c) \right\}$, $\sum_i \phi_i = 1$

  $\tau_i(\{\phi\}) \partial_t \phi_i = \nabla^2 \phi_i + f(\{\phi\}, \mu)$
  $\partial_t [\mu + t(\{\phi\}, \mu)] = \nabla [D(\{\phi\}) \nabla \mu]$
- Egyre bonyolultabb egyenletek (pl. Navier-Stokes)

Általános matematikai modell

Differenciálegyenlet-rendszer

Változók: $p_i(\mathbf{r}, t)$, $i = 1 \ldots N_p$ és $c_j(\mathbf{r}, t)$, $j = 1 \ldots N_c$

$$
\begin{aligned}
\tau_i(\mathbf{p}, \mathbf{c}) \frac{dp_i}{dt} &= \nabla[M_i(\mathbf{p}, \mathbf{c}) \nabla p_i] + f_i(\mathbf{p}, \mathbf{c}) \\
\frac{d}{dt} \left[c_j + t_j(\mathbf{p})\right] &= \nabla \cdot \left(D_j(\mathbf{p}, \mathbf{c}) \nabla \left[g_j(\mathbf{p}, \mathbf{c}) - \nabla[\epsilon_j(\mathbf{p}, \mathbf{c}) \nabla c_j]\right]\right)
\end{aligned}
$$

$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{v}\nabla$ konvektív derivált (mozgó koordinátarendszer)

Miért hasznos?

A megszilárdulás-fázisszeparáció fázismező modellezésének általános egyenletei. $\tau_i(\mathbf{p}, \mathbf{c})$, $M_i(\mathbf{p}, \mathbf{c})$, $f_i(\mathbf{p}, \mathbf{c})$, $t_j(\mathbf{p}, \mathbf{c})$, $D_j(\mathbf{p}, \mathbf{c})$, $g_j(\mathbf{p}, \mathbf{c})$ és $\epsilon_j(\mathbf{p}, \mathbf{c})$ definiálják a problémát.

Feladat

A fenti egyenletrendszerre teljesen spektrális, feltétel nélkül stabil, konvergens séma kidolgozása (HA létezik ilyen), majd a séma implementálása GPU-ra (FFT, PF)

Spektrális séma

A spektrális séma elemei

- A nemlinearitások kezelése **operátor szeleteléssel**:
  - $f() = F + [f() - F]$, ahol $F := \max\{0, \max[f()]\}$
    $\Rightarrow F = const. \geq 0$ és $\Delta f() = f() - F \leq 0$ szétválasztás lehetséges:
    nemnegatív konstans + nempozitiv nemlineáris rész
    $$\nabla[f(\phi)\nabla\phi] = F\nabla^2\phi + \nabla[\Delta f(\phi)\nabla\phi]$$
    - $F\nabla^2\phi \to -F\mathbf{k}^2\tilde{\phi}_k$ (implicit stabil)
    - $\nabla[\Delta F(\phi)\nabla\phi] = \Delta F(\phi)\nabla^2\phi + [\nabla\Delta F(\phi)][\nabla\phi]$ (explicit stabil + ?)
  - $f(\phi) = C\phi + f(\phi) - C\phi$, ahol $C := \max\{0, max[f(\phi)/\phi]\}$
    $\nabla^2 f(\phi) = C\nabla^2\phi + \nabla^2\Delta f \Rightarrow \ldots$ (implicit + explicit + ?)
- Az implicit stabil operátorok leválasztása, spektrális átírás, időléptetés **kernel**
- Az explicit tagok kiszámítása (**cuFFT** + egyedi (i)PF **kernel**ek):
  - $h := \nabla f(\phi)\nabla g(\phi) \to \tilde{h}_k = FFT\{iFFT\{(i\mathbf{k})FFT\{f(\phi)\}\}iFFT\{(i\mathbf{k})FFT\{g(\phi)\}\}\}$
  - $f(\phi)\nabla^2\phi \to \ldots$
  - $\nabla^2 f(\phi) \to \ldots$
- Az időfüggő forrástag miatt $[dt_j(\mathbf{p})/dt]$ eltolt időintegrálás ϕ_i-re és c_j-re

Egykomponensű megszilárdulás

Fázisszeparáció Cahn-Hilliard folyadékban

Eutektikus megszilárdulás sPFT modellje

Eutektikus megszilárdulás MPFT modellje

Összefoglalás

- Fázisátalakulások kontinuum modelljei
- Nemlineáris parabolikus egyenletek és egyenletrendszerek:
  - Térbeli véges differencia módszerek és problémáik
  - Implicit spektrális módszerek
  - Párhozamos implementálás, előnyök: DFT+pontfüggvény!!!
- Akalmazás
  - Fizikai modellek
  - Általános matematikai modell
  - A spektrális módszer elemei:
    - Operátor szeletelés technika
    - explicit és implicit tagok
    - FFT+PF
  - Eredmények: Tipikusan 2-3 nagyságrend gyorsulás!

Köszönöm a figyelmet!