

Operátor-szeletelés alapú spektrális módszerek alkalmazása kétkomponensű ötvözetek fázismező-elméletében Alkalmazás grafikus processzorra

Tóth Gyula, Tegze György, Pusztai Tamás és Gránásy László

MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

GPU nap 2011, MTA-RMKI, Budapest

Tartalom

- 1 Bevezetés
 - Standard kétkomponensű fázismező-elmélet (PFT)
 - Parabolikus differenciálegyenletek
- 2 Véges differencia módszer
- 3 Spektrális módszerek
 - A spektrális módszerek alapjai
 - Lineáris operátorok és nemlineáris függvények: egyszerű példák
 - Kétkomponensű ötvözetek Fázismező-Elmélete
- 4 Eredmények
 - Jackson-Hunt teszt
 - Morfológiai átmenetek
 - Anizotrópia

A kétkomponensű PFT mozgásegyenletei

Szabadenergia-funkcionál:
$$F = \int dV \left\{ \frac{\epsilon_\phi^2}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{\epsilon_c^2}{2} (\nabla c)^2 + f(\phi, c) \right\}$$

- Rendparaméterek:
 - $\phi(\mathbf{r}, t)$: struktúrális rendparaméter (fázismező) - nem megmaradó
 - $c(\mathbf{r}, t)$: kémiai összetétel (koncentráció) - megmaradó
- $f(\phi, c)$ a lokális szabadenergia-sűrűség - ϕ és c **nemlineáris** függvénye!

A fázismező mozgásegyenlete

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -M_\phi \frac{\delta F}{\delta\phi} \quad (\text{első funkcionális derivált})$$

A kémiai összetétel mozgásegyenlete

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \mathbb{J} = 0, \quad \text{ahol } \mathbb{J} = -M_c \nabla \mu \quad \text{és} \quad \mu = \frac{\delta F}{\delta c} \quad \text{a kémiai potenciál}$$

$$\text{A kémiai összetétel mozgásegyenlete: } \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \left[M_c \nabla \left(\frac{\delta F}{\delta c} \right) \right]$$

Nemlineáris PDE - matematikai szemmel

Standard binér PFT → Magasabbrendű, nemlineáris diffúziós egyenletrendszer

$$\text{Szabadenergia-funkcionál: } F = \int dV \left\{ \frac{\epsilon_\phi^2}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{\epsilon_c^2}{2} (\nabla c)^2 + f(\phi, c) \right\}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial\phi}{\partial t} = M_\phi \left(\epsilon_\phi^2 \nabla^2 \phi - \frac{\partial f}{\partial \phi} \right) \quad \& \quad \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \left[M_c(\phi, c) \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial c} - \epsilon_c^2 \nabla^2 c \right) \right]$$

Matematikai szempontból: lineáris operátorok és nemlineáris tagok

- Elsőrendű időderivált: $\frac{\partial\phi}{\partial t}$, $\frac{\partial c}{\partial t}$, ...
- Másod- vagy magasabb rendű téroperátorok: ∇^2 , ∇^4 , $\nabla() \cdot \nabla()$, ...
- Nemlinearitások $f(\dots)$ -ben:
 - kétkomponensű PFT: $f(\phi, c) = a g_n(\phi) + p_m(\phi) f_S(c) + [1 - p_m(\phi)] f_L(c)$,
ahol $f_{S,L}(c) = \frac{RT}{V} [c \ln(c) + (1 - c) \ln(1 - c)] + h_I^{S,L}(c)$

Tisztán explicit vs. (részben) implicit időléptetési sémák

Tisztán explicit Euler-módszer

$$\phi_{i,j}^{n+1} = \phi_{i,j}^n + \Delta t \cdot DRHS[\{\{\phi_{i,j}^n\}\}]$$

Elterjedt, kényelmes

Rossz skálázódás

- Stabilitási feltétel^(*):
 $\Delta t < f(D) \cdot h^{\max(n, \nabla^n \phi)}$
- A számítási idő skálázódása
dupla térbeli felbontás esetén:
 $\Rightarrow f_\tau = \frac{\tau'_c}{\tau_c} = 2^{\max(n, \nabla^n \phi) + D}$
- Mozgásegyenlet c -re 3D-ben:
 $\max(n, \nabla^n c) = 4 \Rightarrow f_\tau = 128$

(Részben) implicit módszerek

- "Szeleteljünk": $DRHS = DRHS_e - DRHS_i$
 $\phi_{i,j}^{n+1} + \Delta t \cdot DRHS_i[\{\{\phi_{i,j}^{n+1}\}\}] =$
 $= \phi_{i,j}^n + \Delta t \cdot DRHS_e[\{\{\phi_{i,j}^n\}\}]$
- If $DRHS_i[\{\{\phi_{i,j}^{n+1}\}\}]$ lineáris $\phi_{i,j}^{n+1}$ -ben
 \Rightarrow **Lin. egyenletrendszer: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{f}(\mathbf{y}^n)$**
 - **A stabilitási kritérium eltűnik^(*)**
 - méretfüggő megoldók: direkt vs. iteratív
 - Ha \mathbf{A} közel szinguláris \rightarrow konvergencia?
 - Nehéz párhuzamosítás 2 és 3 dimenzióban

Hogyan tarthatnánk meg csak az előnyöket?

Feltétel nélküli stabilitás mátrixegyenlet nélkül?

Spektrális időléptetési sémák

A valós tér helyett oldjuk meg az egyenletet a spektrumban!

Miért?

- Nincs szükség véges diff. stencilre: $(\nabla^2)^n \phi \rightarrow (-\mathbf{k}^2)^n \cdot \tilde{\phi}_{\mathbf{k}}$
- Az implicit rész pontfüggvény a spektrumban (nem pedig mátrixegyenlet)
- Feltétel nélkül stabil időléptetési sémák felállítása lehetséges!
- A nemlinearitások kezelése: $\tilde{f}_{nl}(\mathbf{k}) = \mathcal{F}\{f_{nl}[\mathcal{F}^{-1}(\tilde{\phi}_{\mathbf{k}})]\}$

Az operátor-szeletelés alapjai

- Eredeti PDE: $\partial_t \phi = \hat{L}[\phi] + f_{nl}(\phi, \nabla \phi, \dots)$
- Átrendezve: $\partial_t \phi = (\hat{L}_i[\phi] + \hat{L}_e[\phi]) + \hat{S}[\phi] + \{f_{nl} - \hat{S}[\phi]\}$
- Implicit stabil tagok: $\hat{L}_i[\phi]$ és $\hat{S}[\phi]$, \hat{S} a szeletelő operátor
- Explicit stabil tagok: $\hat{L}_e[\phi]$ és $f_{nl}^*(\phi, \nabla \phi, \dots) = f_{nl}(\phi, \nabla \phi, \dots) - \hat{S}[\phi]$

A spektrális séma stabilitása

Az operátor-szeletelés alapjai

- Szeleteljünk: $\partial_t \phi = f(\phi, \nabla \phi, \nabla^2 \phi, \dots) = (\hat{L}_i + \hat{S})[\phi] + \{\hat{L}_e[\phi] + f_{nl}^*(\phi, \nabla \phi, \dots)\}$
- $\{1 - \Delta t[\tilde{L}_i(\mathbf{k}) + \tilde{S}(\mathbf{k})]\} \tilde{\phi}_{\mathbf{k}}^{t+1} = [1 + \Delta t \tilde{L}_e(\mathbf{k})] \tilde{\phi}_{\mathbf{k}}^t + \Delta t \tilde{f}_{nl}^*(\phi^t, \nabla \phi^t, \dots)$
- Részben implicit részben spektrális séma: $\tilde{\phi}_{\mathbf{k}}^{t+1} = \tilde{\phi}_{\mathbf{k}}^t + \frac{\Delta t \cdot \tilde{f}^t(\mathbf{k})}{1 - \Delta t[\tilde{L}_i(\mathbf{k}) + \tilde{S}(\mathbf{k})]}$

A séma majdnem feltétel nélkül stabil, majdnem = a nemlinearitástól függ

Tippek az operátorszeleteléshez

- Implicit stabil operátorok: $a_i(\nabla^2)^{2i+1} \phi$ & $-b_i(\nabla^2)^{2i} \phi$, if $a_i, b_i > 0$
- Explicit stabil operátorok: $a_i(\nabla^2)^{2i+1} \phi$ & $-b_i(\nabla^2)^{2i} \phi$, if $a_i, b_i < 0$
- Nemlineáris tagok stabilitása: mindig ellenőrizni kell (esetenként bonyolult)

1. példa: fázisszeparáció Cahn-Hilliard folyadékban

Mozgásegyenlet

- Szabadenergia-funkcionál: $F = \int dV \left\{ \frac{a}{2} (\nabla c)^2 + \frac{(c^2 - 1)^2}{4} \right\}$
- Mozgásegyenlet: $\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 \left(\frac{\delta F}{\delta c} \right) \Rightarrow \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla^2 (c^3 - c - a \nabla^2 c)$

Nincs szükség operátor-szeletelésre, mert:

- $\partial_t c = -a(\nabla^2)^2 c - \nabla^2 c + \nabla^2(c^3) = -a(\nabla^2)^2 \phi + \nabla^2(c^3 - c)$

Időléptetési séma:

$$\tilde{c}_{\mathbf{k}}^{t+1} = \tilde{c}_{\mathbf{k}}^t - \mathbf{k}^2 \Delta t \frac{a \mathbf{k}^2 \tilde{c}_{\mathbf{k}}^t + \tilde{f}_{nl}^t(\mathbf{k})}{1 + \Delta t (a \mathbf{k}^4)}, \text{ where } \tilde{f}_{nl}^t(\mathbf{k}) = \{FFT[c^t(\mathbf{r})^3 - c^t(\mathbf{r})]\}_{\mathbf{k}}$$

2. példa: konzervatív Swift-Hohenberg dinamika (Phase-Field Crystal)

Mozgásegyenlet

- Szabadenergia-funkcionál: $F = \int dV \left\{ \frac{\psi}{2} [r + (1 + \nabla^2)^2] \psi + \frac{\psi^4}{4} \right\}$
- Mozgásegyenlet: $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 [(r + 1)\psi + 2\nabla^2 \psi + \nabla^4 \psi + \psi^3], \quad r + 1 > 0$

Operátor-szeletelés: $+\nabla^2 \psi - \nabla^2 \psi$

- $\partial_t \psi = (r + 2)\nabla^2 \psi + \nabla^6 \psi + 2\nabla^4 \psi + \nabla^2(\psi^3 - \psi)$ (hasonlóan a CH-hoz)

Időléptetési séma

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^{t+1} = \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^t - \mathbf{k}^2 \Delta t \frac{[(r + 2) - 2\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}^4] \tilde{\psi}_{\mathbf{k}} + \tilde{f}_{nl}^t(\mathbf{k})}{1 + \Delta t[(r + 2)\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}^6]}, \quad \tilde{f}_{nl}^t(\mathbf{k}) = \{FFT[(\psi^t(\mathbf{r}))^3 - \psi^t(\mathbf{r})]\}_{\mathbf{k}}$$

Megjegyzések a stabilitáshoz

$\partial_t c = \nabla^2(c^3 - c - a\nabla^2 c) + \xi(\mathbf{r}, t)$, ahol $\xi(\mathbf{r}, t)$ egy konzervatív, színes Gauss-zaj.

$$\partial_t \tilde{c}_k = -k^4 \tilde{c}_k + k^2 \tilde{c}_k - k^2 \mathcal{F}_k(c^3)$$

INSTABIL!

$$\partial_t \tilde{c}_k = -k^4 \tilde{c}_k - k^2 \mathcal{F}_k(c^3 - c)$$

STABIL!

PFT model eutektikus megszilárdulásra

Egyszerű kétkomponensű PFT

Szabadenergia-funkcionál:
$$F = \int dV \left\{ \frac{\epsilon_\phi^2 T}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{\epsilon_c^2 T}{2} (\nabla c)^2 + f(\phi, c) \right\}$$

EOMs:
$$\frac{\partial c}{\partial t} = \tilde{\nabla} \left\{ h(\phi, c) \tilde{\nabla} \left[\frac{\partial \tilde{f}}{\partial c} - \tilde{\epsilon}_c^2 \tilde{\nabla} (\tilde{T} \tilde{\nabla} c) \right] \right\} \quad \text{és} \quad \tau_\phi \frac{\partial \phi}{\partial t} = \tilde{\epsilon}_\phi^2 \tilde{\epsilon}_c^2 \tilde{\nabla} (\tilde{T} \tilde{\nabla} \phi) - \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \phi}$$

Nemlinearitások:
$$\frac{\partial \tilde{f}(\phi, c)}{\partial \phi}, \frac{\partial \tilde{f}(\phi, c)}{\partial c}, h(\phi, c) = [1 + \phi(D_S/D_L - 1)]c(1 - c), \text{ és } \tilde{T}(\mathbf{r})$$

Anizotróp kétkomponensű PFT

Szabadenergia-funkcionál:
$$F = \int dV \left\{ \frac{\epsilon_\phi^2(\mathbf{n})T}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{\epsilon_c^2(\mathbf{n})T}{2} (\nabla c)^2 + f(\phi, c) \right\}$$

Új típusú nemlineáris tagok:
$$\epsilon_\phi^2(\nabla\phi/|\nabla\phi|) \text{ és } \epsilon_c^2(\nabla c/|\nabla c|)$$

EOMs:
$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \left\{ M_c(\phi, c) \nabla \left[\frac{\partial l}{\partial c} - \nabla \left(\frac{\partial l}{\partial \nabla c} \right) \right] \right\} \quad \text{és} \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left[\nabla \left(\frac{\partial l}{\partial \nabla \phi} \right) - \frac{\partial l}{\partial \phi} \right]$$

PFT model eutektikus megszilárdulásra

Az operátor-szeletelés koncepciója^[1]

- 1 Fejtsük ki analitikusan a differenciálegyenlet teljes jobb oldalát
- 2 Azonosítsuk a $(-1)^{i+1} g_i^{\phi,c}(\phi, c, \nabla\phi, \nabla c, \dots) \nabla^{2i}(\phi, c)$ típusú tagokat
- 3 Vegyük $S_i^{\phi,c} := \max\{\max[g_i^{\phi,c}(\phi, c \nabla\phi, \nabla c, \dots)], 0\} \geq 0$
- 4 A szeletelő operátor: $\tilde{S}^{\phi,c}(\mathbf{k}) = -\sum_{i=1}^N S_i^{\phi,c} \mathbf{k}^{2i}$
- 5 $\partial_t(\phi, c) = \hat{S}^{\phi,c}[\phi, c] + \sum_{i+1}^N (-1)^{i+1} [g_i^{\phi,c}(\dots) - S_i^{\phi,c}] \nabla^{2i}(\phi, c) + h^{\phi,c}(\dots)$
- 6 $g_i^{\phi,c}(\dots) - S_i^{\phi,c} \leq 0 \Rightarrow$ explicit stabil tagok és $\hat{S}^{\phi,c}[\phi, c]$ implicit stabil tagok
- 7 $h^{\phi,c}(\phi, c, \nabla\phi, \nabla c, \dots)$ még lehet instabil!
 \Rightarrow A maradék nemlineáris tagok $[h(\cdot)]$ stabilitásvizsgálata!

[1] G. Tegze et al, *J. Comp. Phys.* **228**, 1612 (2009)

Miért érdemes GPU-ra alkalmazni?

Előnyök

- A klasszikus PC-klaszterekhez képest magasan költséghatékony
- Beépített könyvtárak (CUFFT, CUSPARSE, CURAND, CUBLAS)
- Egyszerű saját kernelek, könnyű kivitelezés
- A teljes számítási idő az FFT idejével megy
- A GPU-k fejlesztése nagy erővel folyik...

Hátrányok

- Az FFT skálázódása: $N \log(N)$ - nem ideális GPU-ra
- Memória limitált (3 – 4G)
- Az adatmásolás sávszélesség-limitált (PCI-Express)

A jövő...

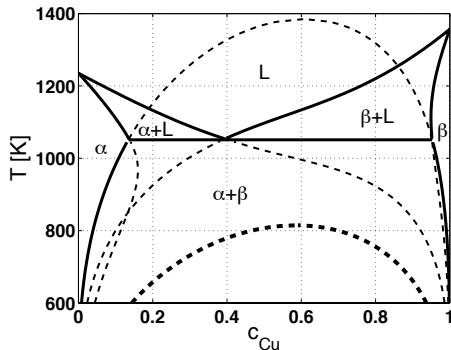
- FFT adaptív hálón - memóriagény csökkentése
- Multi-GPU (OpenMP) & multi-PC verzió (mpi)

Binér PFT ezüst-réz rendszerre

Fizikai paraméterek

- Termodinamika (CALPHAD)
- Felületi szabadenergia:
 $\gamma_{Ag} = 172[mJ/m^2]$,
 $\gamma_{Cu} = 227[mJ/m^2]$
- Határrétegvastagság:
 $d_{SS} \approx d_{SL} \approx 1[nm]$
- Diffúziós állandó:
 $D_L = 10^{-9}[m^2/s]$,
 $D_S/D_L = 0.01 \dots 1$
- Kinetikus együttthatók:
 $M_\phi/M_c \approx 2$

Az ezüst-réz rendszer fázisdiagramja:



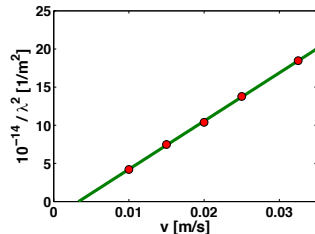
Eredmények

2D: lamellás megszilárdulás - $\lambda^2 v = ?$

húzott minta (v_{pull}), $T(\mathbf{r})$ profil (periodikus BC), izotróp rendszer, $D_L = D_S$ (durva)
A megszilárdulási front megáll, amint $v_{solidification}(T^*) \equiv v_{pull}$

Jackson-Hunt teszt: $\lambda^2 v = const.?$

λ : lamella távolság, v : frontsebesség



Az találtuk, hogy $(v + a)\lambda^2 = const.$
(nagy túlhűtés: 200 – 300[K])

Eredmények

2D: Lamelláris \rightarrow globuláris \rightarrow sávós átmenet

húzott minta (v_{pull}), $T(\mathbf{r})$ profil (periodikus BC), izotróp rendszer, $D_L = 0.01D_S$

Túlhűtés: $\Delta T = 300 \dots 350[K]$, $v_{pull} = 0.06 \dots 0.08[m/s]$

$$\Delta T = 270[K], \\ v_{pull} = 4.5[cm/s]$$

$$\Delta T = 280[K], \\ v_{pull} = 5.0[cm/s]$$

$$\Delta T = 290[K], \\ v_{pull} = 5.5[cm/s]$$

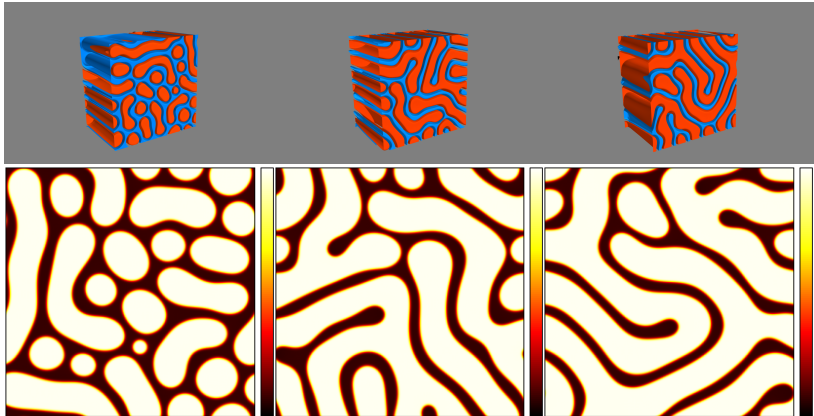
$$\Delta T = 300[K], \\ v_{pull} = 6.0[cm/s]$$

$$\Delta T = 310[K], \\ v_{pull} = 6.5[cm/s]$$

3D: rúd \rightarrow lamella átmenet

húzott minta (v_{pull}), $T(\mathbf{r})$ profil (periodikus BC), izotróp rendszer, $D_L = D_S$

Túlhűtés: $\Delta T = 155[K]$, $v_{pull} = 0.01[m/s]$, $c = 0.7, 0.75, 0.8$



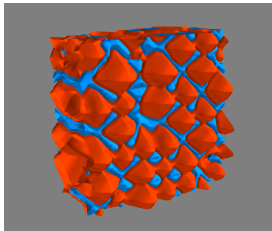
Anizotróp kétkomponensű PFT

Paraméterek

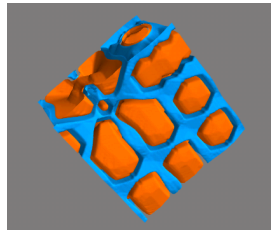
húzott minta (v_{pull}), $T(\mathbf{r})$ profil (periodikus BC), $D_L = D_S$

Túlhűtés: $\Delta T = 155[K]$, $v_{pull} = 0.01[m/s]$, $c = 0.6 \dots 0.7$

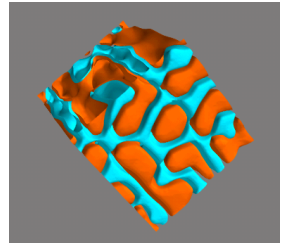
Köbös anizotrópia $\epsilon_\phi^2(\mathbf{n})$ -ben



6-fogású sík a. $\epsilon_c^2(\mathbf{n})$ -ben



köbös + 6-fogású sík



Nincs jelen rácsanizotrópia, $-\mathbf{k}^{2n} \tilde{\phi}_{\mathbf{k}}$ minden térinformációt tartalmaz!

Operátor-szeletelés-alapú részben implicit - részben spektrális sémák parabolikus egyenletrendszerekre

ÖSSZEFOGLALÁS

- Feladat: kétkomponensű ötvözetek megszilárdulásának fázismező-elméleti modellezése
- Véges differencia módszer
 - Stabilitási kritérium \Rightarrow rossz skálázódás
 - Teljes explicit vs. (részben) implicit módszerek
- Spektrális módszerek
 - Az operátor-szeletelés alapjai
 - "Feltétel nélkül" stabil részben spektrális, részben implicit sémák
- Alkalmazás GPU-ra
 - Költséghatékony, kényelmes használat, gyors fejlődés
 - Az FFT nem ideális GPU-ra + memória sávszélesség korlát
- Eredmények az ezüst-réz rendszerre
 - Lamellás megszilárdulás és a Jackson-Hunt teszt
 - Morfológiai átmenetek, anizotróp megszilárdulás