Применение радиальных базисных функций для межсеточной интерполяции при параллельном решении сопряженных задач

С.П. Копысов, И.М. Кузьмин, Л.Е. Тонков, А.К. Новиков

Институт механики УрО РАН
Ижевск, Россия

Международная конференция «Суперкомпьютерные дни в России»
25 — 26 сентября 2017
Москва, Россия

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты: 16-37-00060, 16-01-00129, 17-01-00402).

Содержание

1. Введение
   - Сопряженная задача
   - Интерполяция давления
2. Уменьшение вычислительных затрат
   - Сокращение системы уравнений
   - Использование параллельных вычислений
3. Выводы

Подходы к моделированию сопряженных задач

- Монолитный: общий алгоритм решения на согласованной сетке, не учитывается особенности каждой из задач
- **Разделенный:** сочетание подходов, эффективно решающих конкретные задачи
  - Использование собственных сеток при решения каждой из сопрягаемых задач
  - Интерполяция данных решения на общей границе

Подходы к моделированию сопряженных задач

- Монолитный: общий алгоритм решения на согласованной сетке, не учитывается особенности каждой из задач
- **Разделенный:** сочетание подходов, эффективно решающих конкретные задачи
  - Использование собственных сеток при решения каждой из сопрягаемых задач
  - Интерполяция данных решения на общей границе

Разделенный подход включает решение следующих подзадач на шаге $t + \Delta t$:

- Решение задачи газодинамики: $\mathrm{p}_f = \mathcal{F}\left(\mathrm{u}_f\right)$
- Решение динамики твердого тела: $\mathrm{u}_s = \mathcal{S}\left(\mathrm{p}_s\right)$
- Интерполяция данных
  - Интерполяция давления: $\mathrm{p}_s = \mathcal{I}\left(\mathrm{p}_f\right)$
  - Деформирование расчетной сетки: $\mathrm{u}_f = \mathcal{D}\left(\mathrm{u}_s\right)$

Бессеточные методы интерполяции

- метод обратных взвешенных расстояний (IDW)*
  достоинства: бессеточная интерполяция данных, быстрый результат
  недостатки: высокая погрешность при интерполяции неоднородно распределенных данных
- **метод радиальных базисных функций**
  достоинства: бессеточная интерполяция, небольшая погрешность интерполяции в случае неоднородного распредения ланных
  недостатки: решение системы линейных уравнений

*Shepard D. A Two-dimensional Interpolation Function for Irregularly-spaced Data // Proceedings of the 23rd ACM National Conference. 1968. P. 517-524.

Бессеточные методы интерполяции

- метод обратных взвешенных расстояний (IDW)*
  достоинства: бессеточная интерполяция данных, быстрый результат
  недостатки: высокая погрешность при интерполяции неоднородно распределенных данных
- **метод радиальных базисных функций**
  достоинства: бессеточная интерполяция, небольшая погрешность интерполяции в случае неоднородного распредения ланных
  недостатки: решение системы линейных уравнений

Функция	$\phi(\|\mathrm{x}\|)$
Глобальные	
Гауссиан	$e^{-\|\mathrm{x}\|^2}$
Мультиквадратичная	$\sqrt{1+\|\mathrm{x}\|^2}$
Сплайн тонкой пластины	$\|\mathrm{x}\|^2 \log \|\mathrm{x}\|$
Локальные	
Ву	$1-\|\mathrm{x}\|$
Ву	$(1-\|\mathrm{x}\|)^3\,(1+3\,\|\mathrm{x}\|^3)$
Вендланда	$(1-\|\mathrm{x}\|)^2$

*Shepard D. A Two-dimensional Interpolation Function for Irregularly-spaced Data // Proceedings of the 23rd ACM National Conference. 1968. P. 517-524.

Метод радиальных базисных функций

p_f — известное давление, определенное на границе области, занимаемой газом,
p_s — искомое давление на границе области твердого тела.

$$\begin{bmatrix} \mathrm{W}_{ff} & \mathrm{P}_f \\ \mathrm{P}_f^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{p}_f \\ 0 \end{bmatrix} \text{ или } \mathrm{A}\gamma = \mathrm{b} \tag{1}$$

W_{ff} — матрица размерности $n_f \times n_f$, $w_{ij} = \phi(\,\|\mathrm{x}_f^i - \mathrm{x}_f^j\|\,)$, $1 \leqslant i,\, j \leqslant n_f$

P_f — матрица столбцов вида $\left[1\ \mathrm{x}_f^j\right]$

α, β — искомые коэффициенты интерполянта

n_f — число точек интерполяции

$$\mathrm{p}_s = [\mathrm{W}_{sf}\mathrm{P}_s] \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \tag{2}$$

W_{sf} — матрица размерности $n_s \times n_f$, $w_{ij} = \phi(\,\|\mathrm{x}_s^i - \mathrm{x}_f^j\|\,)$, $1 \leqslant i \leqslant n_s$

P_s — матрица столбцов вида $\left[1\ \mathrm{x}_s^j\right]$

n_s — число точек для которых ищется давление

Уменьшение вычислительных затрат интерполяции

- сокращение затрат на решение системы уравнений:
  - использование локальных базисных функций (разреженная система)
  - уменьшение числа точек интерполяции (сокращение размерности системы)
- использование параллельных вычислений:
  - использование GPU для решения системы уравнений
  - паралелльные формирование матриц и векторные операции
  - безматричное решение системы

Послойное разделение*

Особенности послойного разделения:

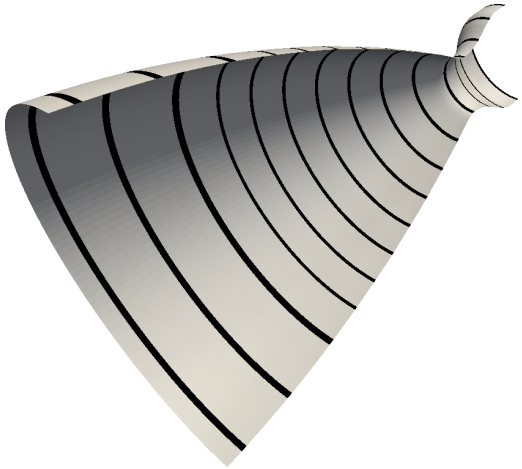
- основано на отношении соседства (известны соседи внутри слоя)
- построение слоев возможно на неструктурированной сетке
- возможно объединение слоев для уточнения областей интерполяции

Послойное разделение*

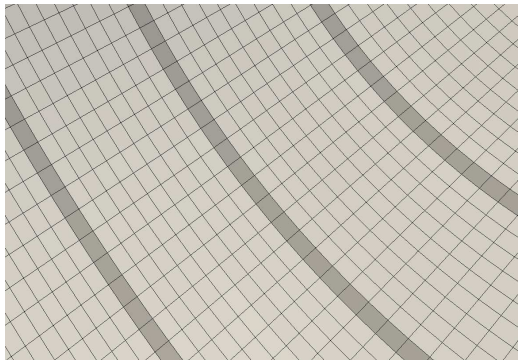
Особенности послойного разделения:

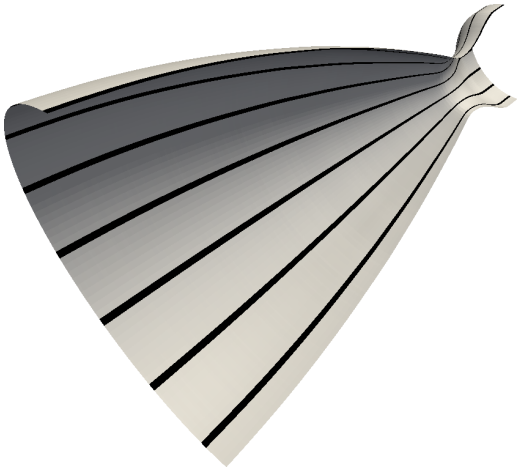
- основано на отношении соседства (известны соседи внутри слоя)
- построение слоев возможно на неструктурированной сетке
- возможно объединение слоев для уточнения областей интерполяции

Рассмотрим интерполяцию давления на примере сопряженной задачи взаимодействия сверхзвукового сопла с высокой степенью геометрического расширения с потоком газа**.



Равномерный выбор слоев вдоль образующих





Равномерный выбор слоев вдоль сечения

*Novikov A., Piminova N., Kopysov S., Sagdeeva Y. Layer-by-Layer Partitioning of Finite Element Meshes for Multicore Architectures // CCIS V. 687 (2016)
**Wang T.S., Zhao X., Zhang S. Aeroelastic Modeling of a Nozzle Startup Transient // JPP. V. 30 (2013)

Качество интерполяции при равномерном выборе точек, %

		Вдоль образующих / Вдоль сечения			
	28800	9600	5760	2880	960
$1 - \|\mathrm{x}\|$	0.24	3.79 / 0.34	10.4 / 0.92	15.2 / 10.8	349.6 / 214.3
$(1 - \|\mathrm{x}\|)^2$	0.78	7.79 / 1.58	69.3 / 9.34	74.3 / 15.9	365.4 / 36.5
$\mathrm{IDW}_{p=3}$	14.2	50.6 / 53.9	105 / 111	189 / 205	407.0 / 534.2
$e^{-\|\mathrm{x}\|^2}$	0.54	1.18 / 1.07	2.68 / 3.99	8.04 / 5.41	147.6 / 101.6
$\|\mathrm{x}\|^2 \log \|\mathrm{x}\|$	0.01	0.23 / 0.01	1.07 / 0.21	5.95 / 1.13	28.61 / 21.6

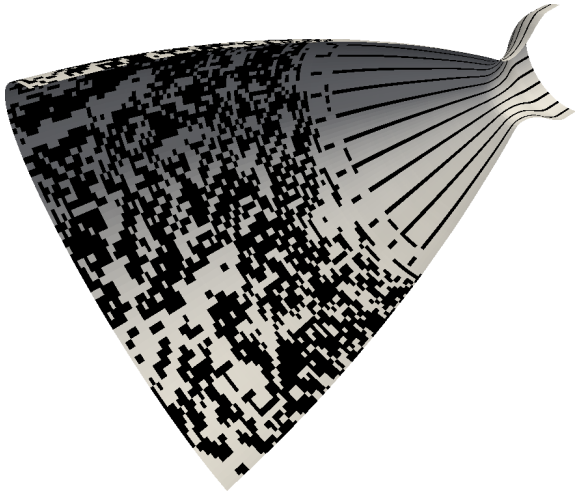
Адапатиный алгоритм интерполяции на основе послойного разделения

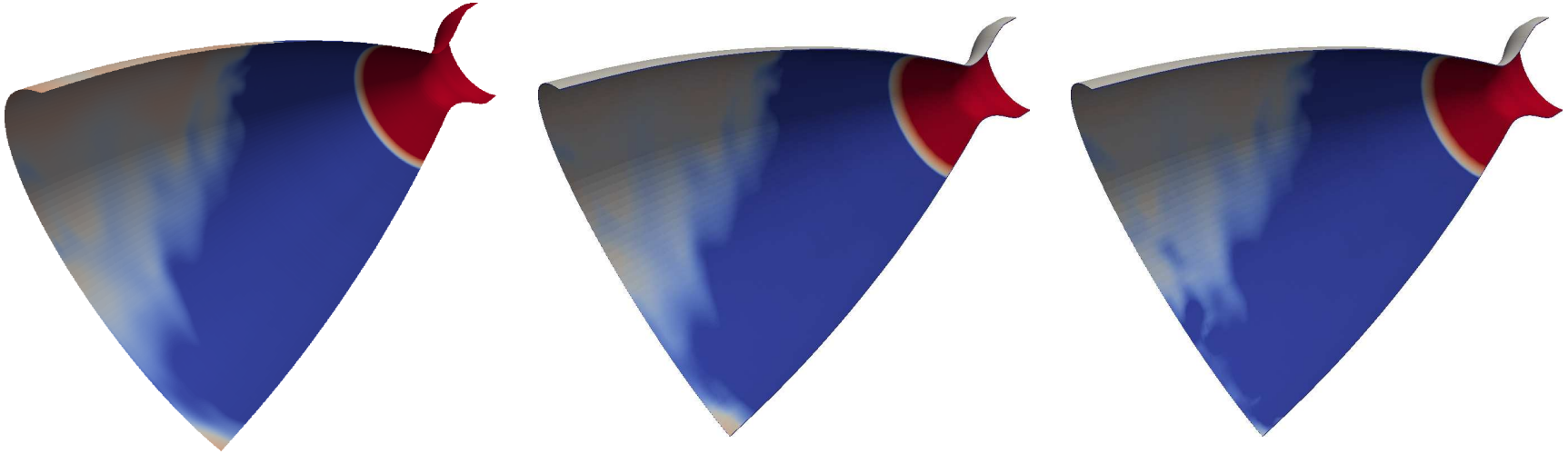
1. Строим на основе исходной сетки максимально возможное число слоев
2. Выбираем среди них слои на основе максимального $\mathrm{grad}\,\mathrm{p}_f$
3. В каждом оставшемся слое, аналогично выбору слоев, выбираем точки интерполяции
4. Формируем и решаем систему уравнений (1) для поиска коэффициентов интерполянта α, β
5. Находим решение задачи интерполяции p_s из соотношения (2)
6. Вычисляем погрешность интерполяции
7. Если она не удовлетворяет заданной точности, то возвращаемся к шагу 2.

Качество интерполяции при адаптивном выборе точек, %

		Равномерный выбор / Адаптивный алгоритм			
	28800	9600	5760	2880	960
$1 - \|\mathrm{x}\|$	0.24	0.34 / 1.23	0.92 / 1.14	10.8 / 0.93	214.3 / 4.89
$(1 - \|\mathrm{x}\|)^2$	0.78	1.58 / 0.67	9.34 / 1.75	15.9 / 2.41	36.5 / 1360
$\mathrm{IDW}_{p=3}$	14.2	53.9 / 26.1	111 / 27.3	205 / 30.8	534.2 / 85.1
$e^{-\|\mathrm{x}\|^2}$	0.54	1.07 / 0.94	3.99 / 1.12	5.41 / 0.82	101.6 / 9.61
$\|\mathrm{x}\|^2 \log \|\mathrm{x}\|$	0.01	0.01 / 0.03	0.21 / 0.25	1.13 / 1.11	21.6 / 3.65

Распределение давления, число точек интерполяции $n_f = 9213$

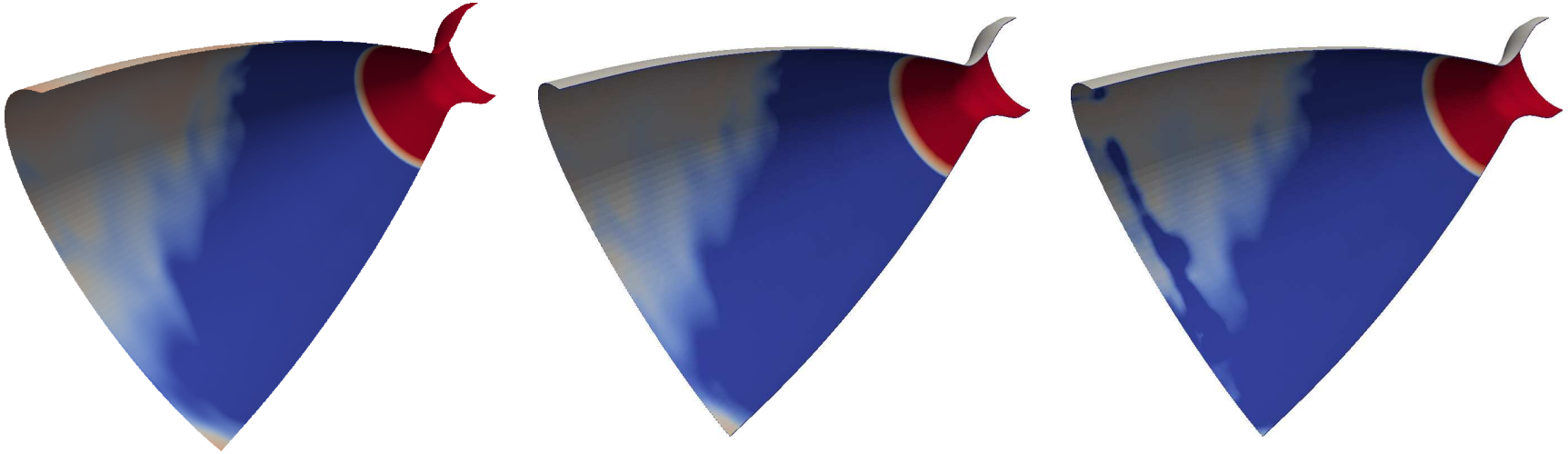




а) б) в)

а) заданное давление; б), в) полученное давление для $\phi = e^{-\|\mathrm{x}\|^2}$ и $\phi = 1 - \|\mathrm{x}\|$.

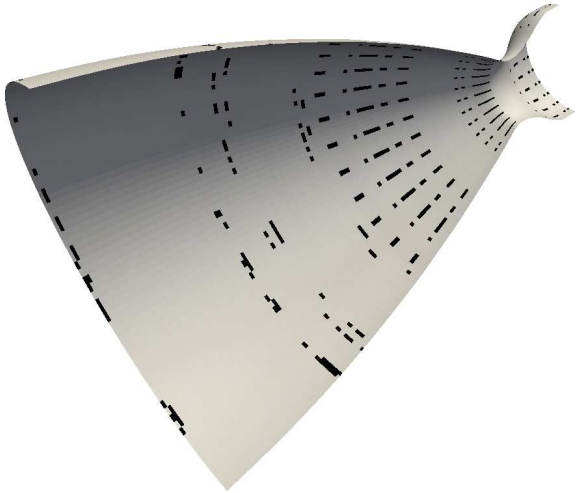
Распределение давления, число точек интерполяции $n_f = 5595$

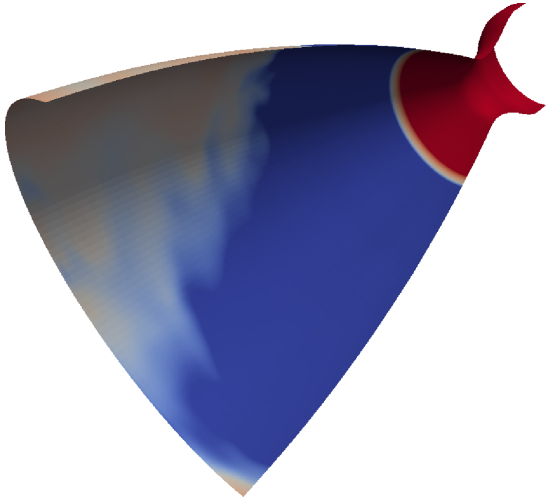


а) б) в)

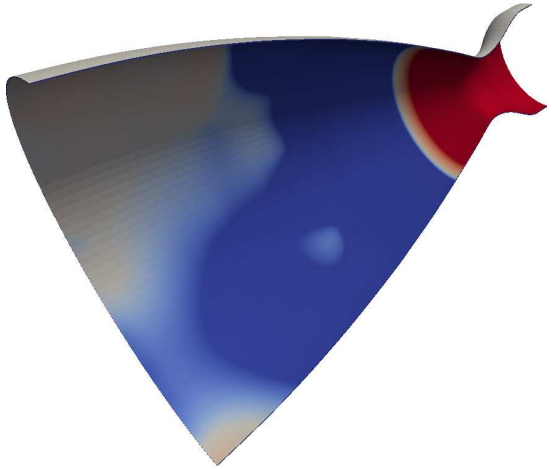
а) заданное давление; б), в) полученное давление для $\phi = e^{-\|\mathrm{x}\|^2}$ и $\phi = 1 - \|\mathrm{x}\|$.

Распределение давления, число точек интерполяции $n_f = 909$

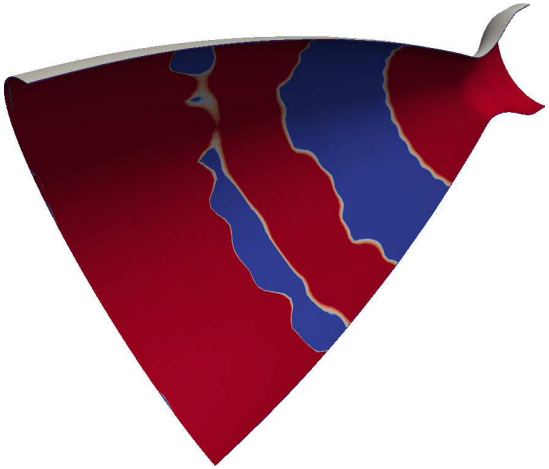




а)



б)



в)

а) заданное давление; б), в) полученное давление для $\phi = e^{-\|\mathrm{x}\|^2}$ и $\phi = 1 - \|\mathrm{x}\|$.

Решение системы уравнений $\mathrm{A}\,\gamma = \mathrm{b}$

- решение системы уравнений с собранной матрицей
  достоинства: параллельное формирование матрицы, матрица вычисляется один раз
  недостатки: большой объем памяти, требуемый для хранения матрицы, при использовании GPU необходимо копирование в память GDDR
- решение системы уравнений в безматричной форме
  достоинства: сокращение требуемой памяти, кратно размеру системы
  недостатки: многократное формирование матрицы

Решение системы уравнений $\mathrm{A}\,\gamma = \mathrm{b}$

- решение системы уравнений с собранной матрицей
  достоинства: параллельное формирование матрицы, матрица вычисляется один раз
  недостатки: большой объем памяти, требуемый для хранения матрицы, при использовании GPU необходимо копирование в память GDDR
- решение системы уравнений в безматричной форме
  достоинства: сокращение требуемой памяти, кратно размеру системы
  недостатки: многократное формирование матрицы

Время формирования и копирования матрицы A, с

			960	9600	19200	28800
Формирование матрицы A	CPU	1	0.098	5.655	33.91	60.85
		8	0.018	0.907	6.166	12.16
			Безматричная форма			
		—	0.0	0.0	0.0	0.0
Копирование A в GDDR	GPU	1	0.009	0.312	0.842	—
		2	0.006	0.125	0.433	1.393
			Безматричная форма			
		—	0.0	0.0	0.0	0.0

Оценка времени интерполяции для функции $e^{-\|x\|^2}$, с

			960	9600	19200	28800
Решение системы $\mathrm{A}\,\gamma = \mathrm{b}$	CPU	1	3.343	592.8	4732	10359
		8	0.271	86.82	946.6	2273
	GPU	1	0.288	2.282	12.11	—
		2	1.262	2.354	8.643	16.19
	Безматричная форма					
	CPU	8	1.712	249.5	1489	4492
	GPU	1	0.471	14.01	91.59	191.1
		2	1.226	8.664	47.03	95.58
Общее время	CPU	1	3.438	598.5	4765	10419
		8	0.288	86.82	952.7	2285
	GPU	1	0.317	3.53	19.12	—
		2	1.283	3.38	15.24	29.74
	Безматричная форма					
	CPU	8	1.712	249.6	1489	4492
	GPU	1	0.472	14.01	91.59	191.1
		2	1.226	8.664	47.03	95.58

Выводы

- Адаптивный выбор точек, учитывающий особенности распределения интерполируемых сеточных данных, позволяет их существенно сократить, при этом сохраняя качество самой интерполяции
- При нерегулярном распределении сеточных данных, наиболее эффективными являются глобальные базисные функции, позволяющие сократить объем данных, участвующих в интерполяции до 15 раз
- Сокращение данных приводит к уменьшению размерности системы уравнений, что, вместе с использованием GPU и многопоточности, позволяет уменьшить время вычислений, затрачиваемое на интерполяцию в десятки раз
- Использование безматричного алгоритма при интерполяции на основе РБФ позволяет сократить размер используемой памяти кратно размерности решаемой системы
- Максимальное возможное число уравнений при решении на двух GPU с 4Gb GDDR методом сопряженных градиентов с диагональным предобуславливателем достигает числа 10^9