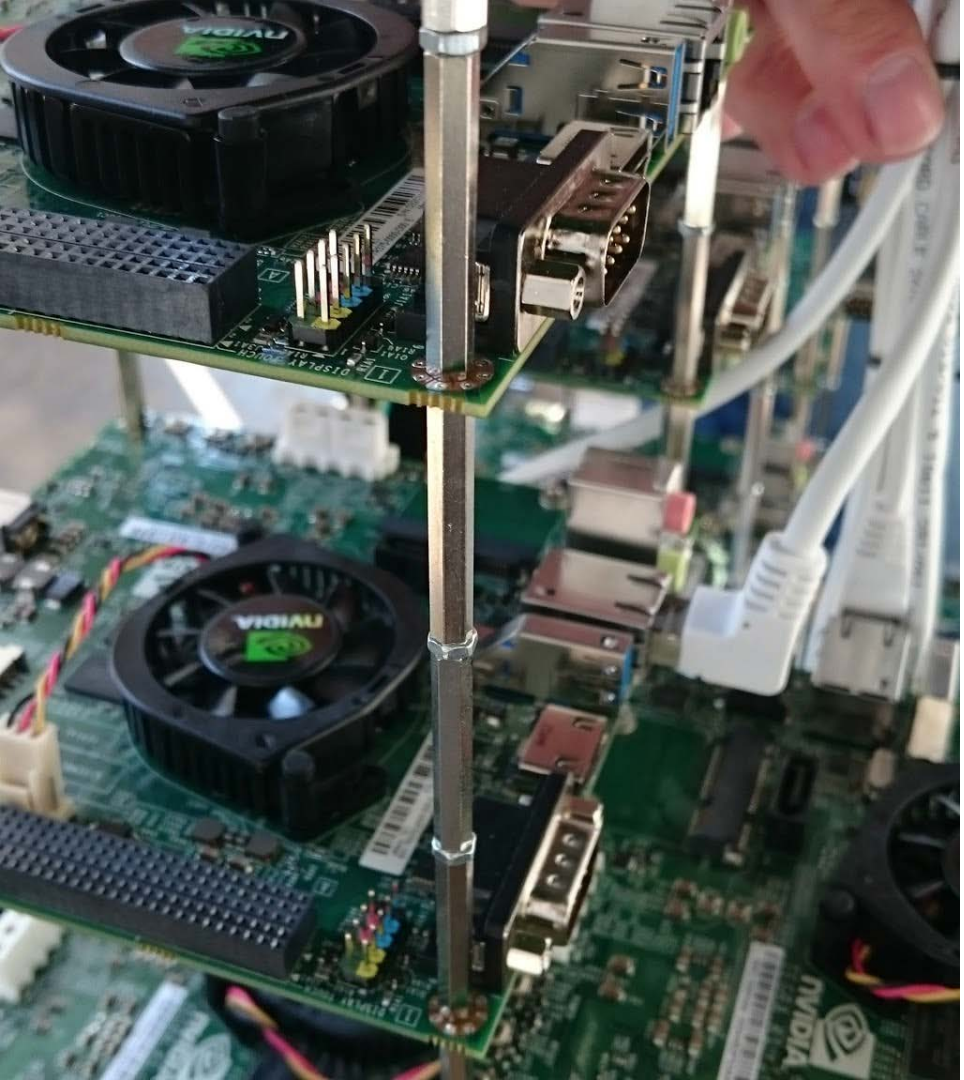
Lernt es noch oder simuliert es schon?

Markus Geveler ,
Hannes Ruelmann ,
Stefan Turek

@ DoDSC Colloqium 2019

Über Ansätze zur Nutzung von Künstlicher Intelligenz für die Lösung von Partiellen Differentialgleichungen in der Strömungssimulation

technische universität dortmund
fakultät für mathematik



technische universität dortmund

fakultät für mathematik

Wir @ TU Dortmund University

markus.geveler@math.tu-dortmund.de

hannes.ruelmann@math.tu-dortmund.de

stefan.turek@math.tu-dortmund.de

FEAT

Fortschrittliche Numerik Techniken für die Strömungssimulation,
Hardware-oriented Numerics,
Multilevel Domain Decomposition Löser,
High performance und high quality CFD Simulationen

Unkonventionelles High Performance Computing

www.mathematik.tu-dortmund.de/lsiii/

Parallele Multilevel **Pressure Schur Complement** Löser

- Pressure Poisson Problem ist ressourcenintensivste Komponente
- Rekursive Domain Decomposition Newton - Krylov - ***Multigrid Löser***
- Lokal: **Geometrische Mehrgitterlöser** mit hohem Hardware-Optimierungsgrad
- **der Glätter** bestimmt die totale Effizienz

Wie löst man?

NSEs

$$\begin{aligned} u_t - \nu\Delta u + u\cdot\nabla u + \nabla p &= f, \\ -\nabla\cdot u &= 0 \end{aligned}$$

weak form

$$\begin{aligned} \int_\Omega \partial_t u\ v\ dx + \int_\Omega (u\cdot\nabla u)\ v\ dx - \nu\int_\Omega \Delta u\ v\ dx + \int_\Omega \nabla p\ v\ dx &= \int_\Omega f\ v\ dx \\ \int_\Omega (\nabla\cdot u)\ q\ dx &= 0 \end{aligned}$$

FEM

$$\begin{aligned} (\partial_t u_h, v_h) + (u_h\cdot\nabla u_h, v_h) + \nu(\nabla u_h, \nabla v_h) - (p_h, \nabla\cdot v_h) &= (f, v_h) \\ -(q_h, \nabla\cdot u_h) &= 0 \end{aligned}$$

matrix form

$$\begin{bmatrix} M & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \partial_t u \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} K(u)+\nu L & B \\ -B^T & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ 0 \end{bmatrix}$$

theta scheme

$$S(u) = \alpha M + \theta\Delta t(K(u)+\nu L)$$

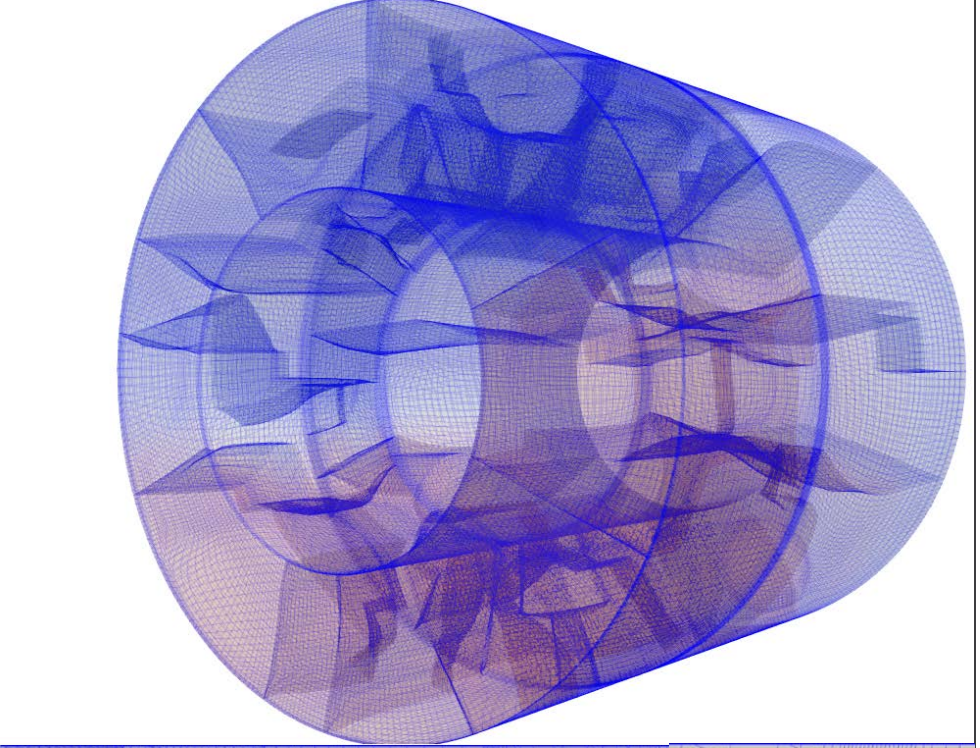
$$g = [M - (1-\theta)\Delta t(K(u)+\nu L)]\cdot u^n + \theta\Delta t F^{n+1} + (1-\theta)\Delta t F^n.$$

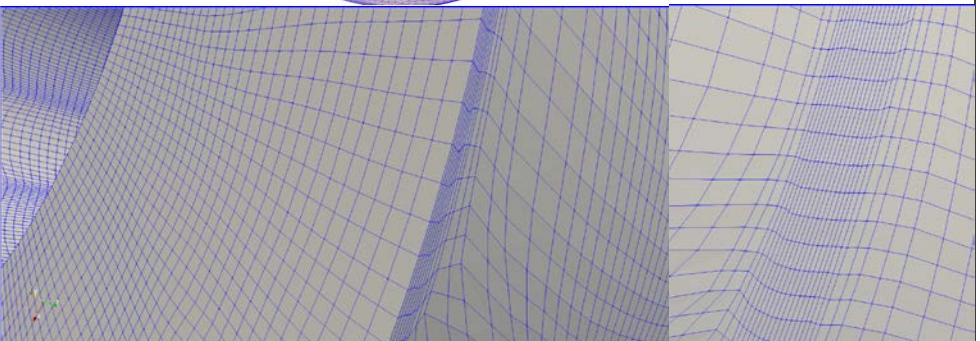
$$\begin{bmatrix} S(u) & B \\ -B^T & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g \\ 0 \end{bmatrix}$$

decouple + magic

$$S(\tilde{u})\cdot\tilde{u} = f_{FP}$$

$$P\cdot q = \frac{1}{\Delta t}B^T\cdot\tilde{u}$$

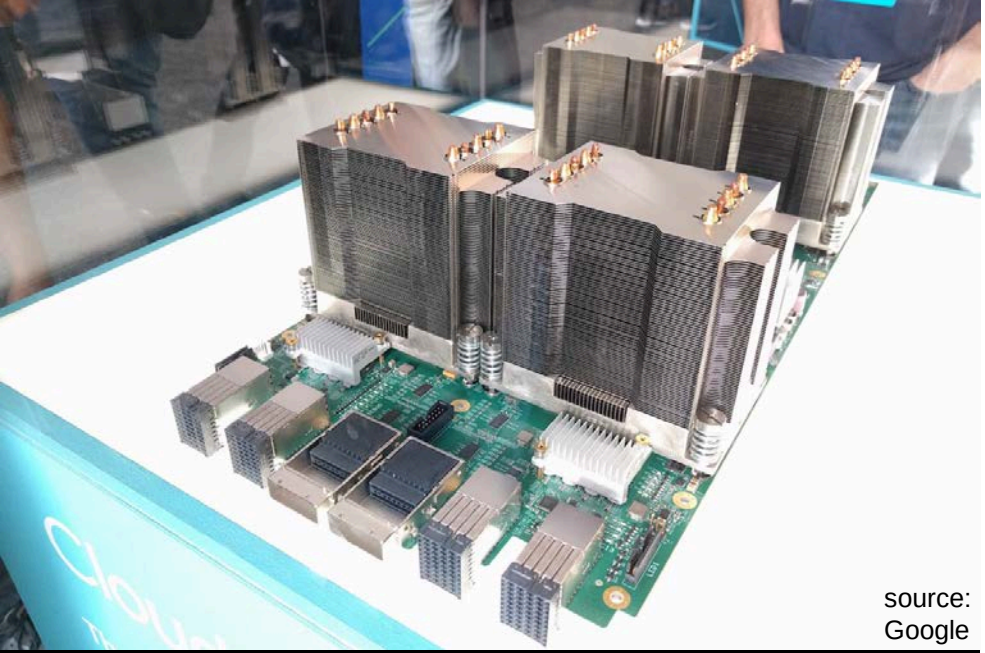




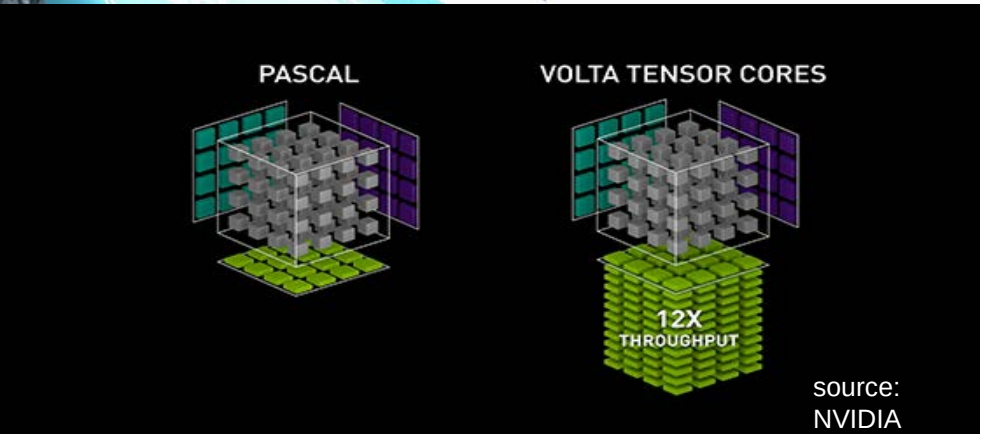
Echtweltprobleme erfordern komplexe (unstrukturierte) Gitter

Diese Raumdiskretisierung führt auf ein riesiges, dünn besetztes, lineares Gleichungssystem

Komplexe Geometrie heisst oft: Gitteranisotropien !



source: Google



source: NVIDIA

Was ist der nächste große Wurf bei der Hardware?

- Hardware-orientierte Numerik: Algorithmen neu gestalten für hohe numerische und Hardware-Effizienz gleichermaßen
- Chiphersteller richten ihre Produkte auf Machine Learning aus
- Wissenschaftscommunity bestimmt nicht die Hardware. Das tun Massenmärkte.
- Mit GPUs hatten wir Glück: Hohe On-chip Speicherbandbreite bei gleichzeitig hoher Gleitkommaleistung passt perfekt zu unseren Methoden: x10 Performance!
- ML Hardware:
  - (Cloud-)TPUs, Volta and Turing GPUs: Tensor Processing Cores wie in TPUs, low precision instruction sets und libraries

Unsere Idee: ML „im Kleinen“ nutzen, um Wissen zwischen den Simulationen zu transportieren

$$(A_h)_{ij} = \sum_{m=1}^{N} \int_{K_m} \nabla\phi_j \cdot \nabla\phi_i dx = \sum_{m=1}^{N} A_{ij}^{(m)}$$

$$(\mathrm{b}_h)_i = \int_\Omega f\phi_i dx$$

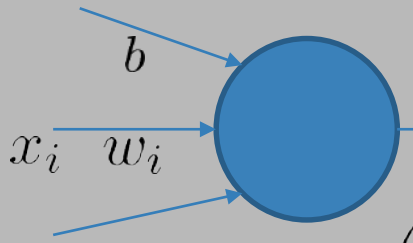
$$A_h x = b_h$$

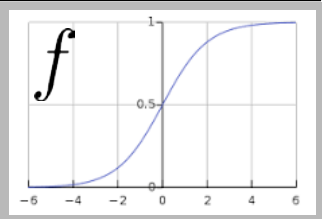
$$M \approx A_h^{-1}$$

Glätter

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega M(b_h - A_h x^{(k)})$$

Gewichte und Bias





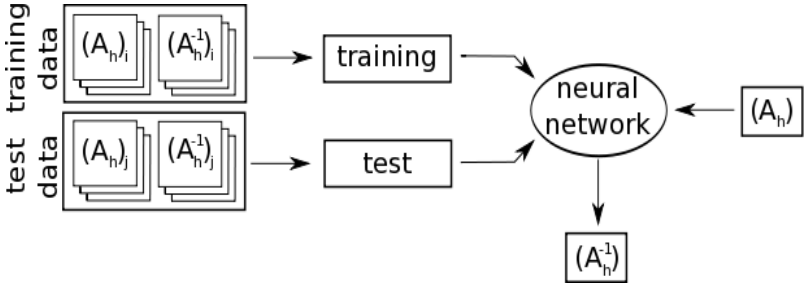
output vom layer davor

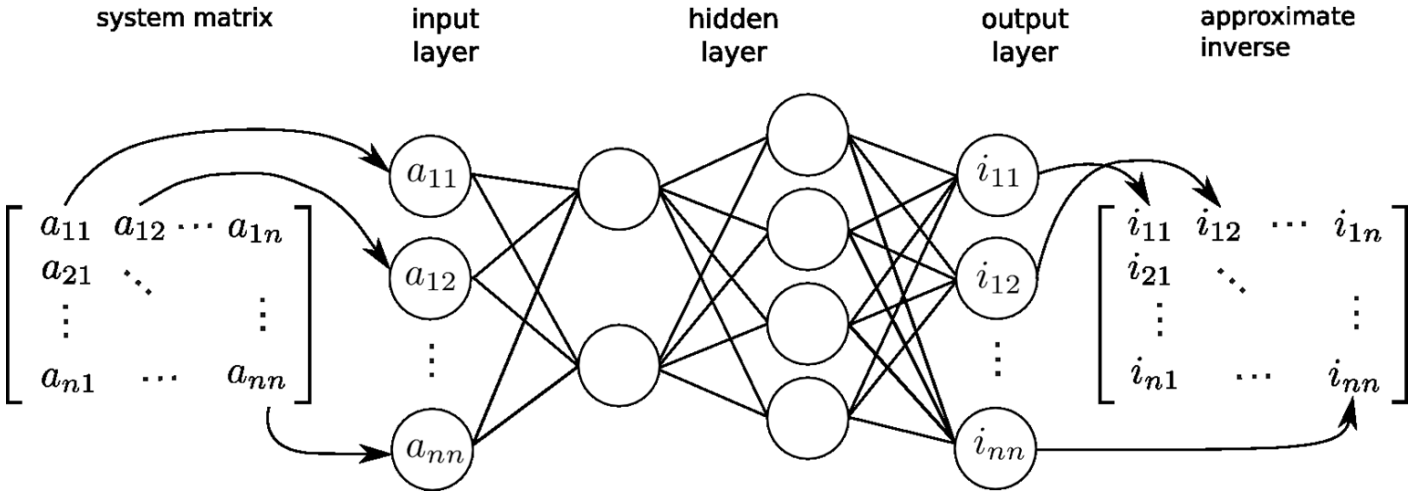
$$y = f\left(\left(\sum_i w_i x_i\right) + b\right)$$

Test und Training

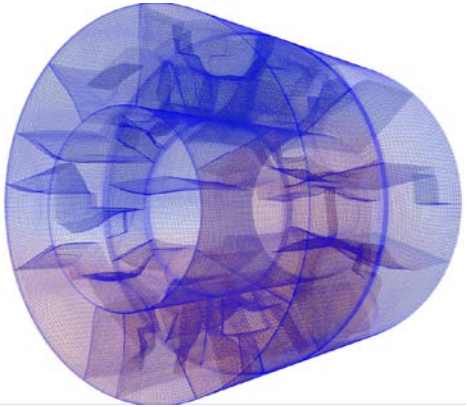
„Einfache Zutaten“

- Multi-Layer Perceptron
- Supervised Learning
- Back Propagation
- Random initialisation





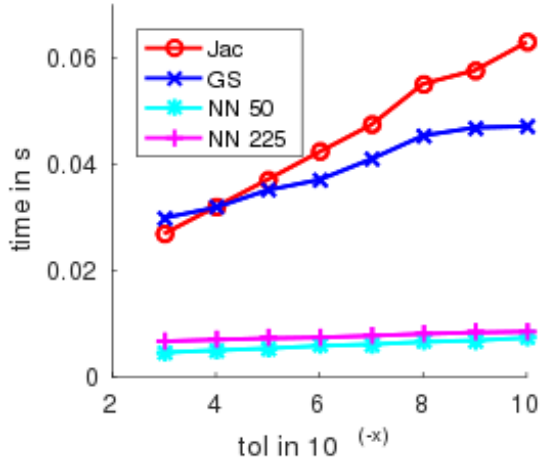
Erste Ergebnisse

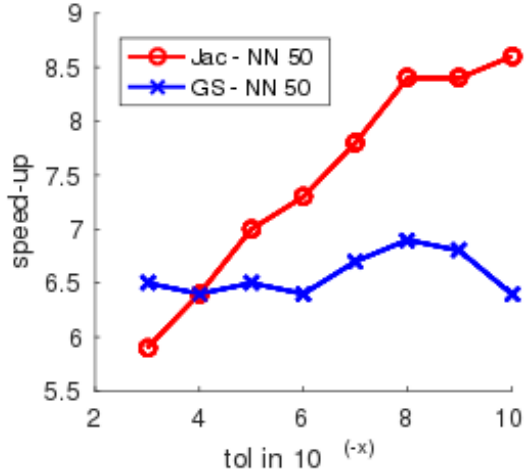


Weniger Löseriterationen….

dim	Jac (0,7)	GS	NN
25	1101	385	22
121	5036	1762	32
529	div	7939	37

…weniger Zeit.







Danke !

Diese Arbeit wurde in Teilen unterstützt durch German Research Foundation (DFG) im Priority Program 1648 ‘Software for Exascale Computing’.

SPPEXA

ENUMATH 2019: We haben Minisymposium !

30th Sep - 4th Okt 2019, Egmond aan Zee, The Netherlands.