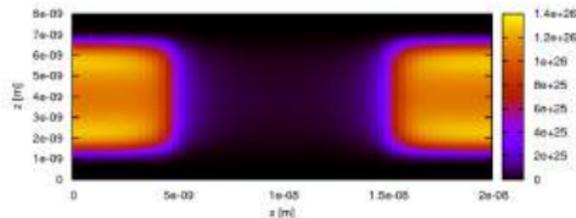
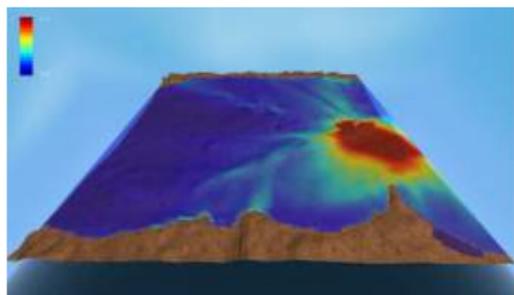


Aceleración en GPU de simulaciones numéricas basadas en Ecuaciones en Derivadas Parciales

José Miguel Mantas Ruiz

Depto. lenguajes y Sistemas Informáticos
Universidad de Granada



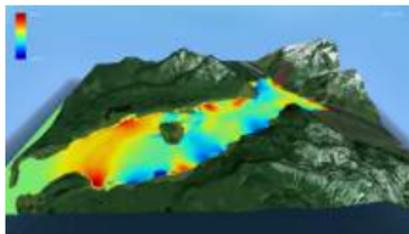
VIII Seminario de Invierno CAPAP-H

Elche, 30 de enero de 2017

Proyecto MTM2014-52056-P. *EDPs No Locales para Sistemas de Partículas: Análisis y Simulación Numérica Acelerada.*

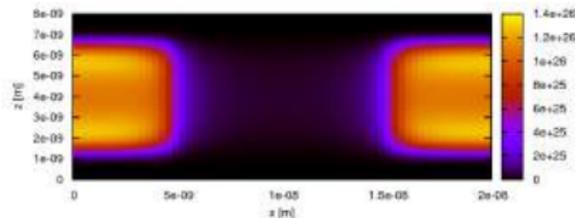
- ▶ **Carácter interdisciplinar:** Modelado matemático y simulación científica + Computación de altas prestaciones.

Simulación de flujos geofísicos en plataformas multiGPU con cuantificación de incertidumbre.



- ▶ **Ecuaciones de aguas someras:** Flujos en ríos, lagos y océanos, inundaciones, tsunamis, etc.

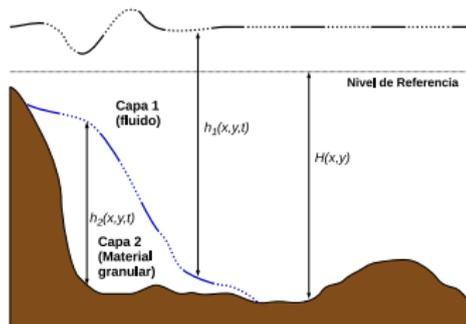
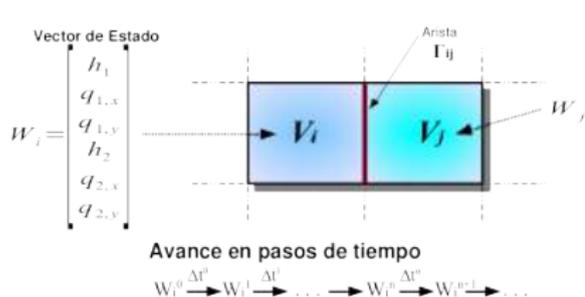
Simulación de nanodispositivos semiconductores en sistemas CPU-GPU.



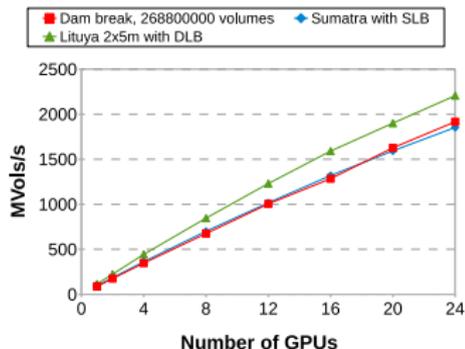
- ▶ **Ecuaciones de Boltzmann + Poisson + Schrödinger:**

Simulación numérica de flujos geofísicos en GPU

Esquemas de Volúmenes Finitos.



Simulación en plataformas multiGPU



Simulación multiGPU de Tsunamis generados por avalanchas

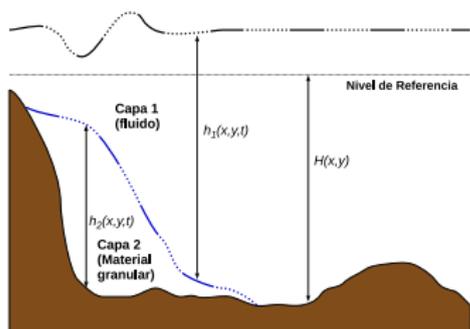


L1. Simulación de flujos geofísicos con incertidumbre

Incertidumbre en las entradas: se propaga a la solución numérica.

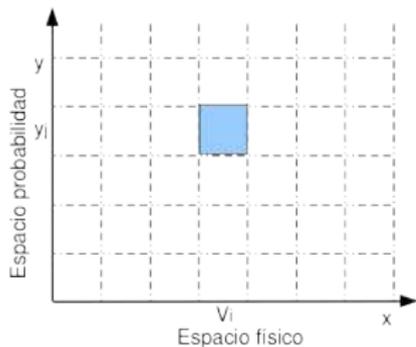
- ▶ **Cuantificación de incertidumbre:** Incorporar matemáticamente en el modelo la incertidumbre en las entradas.
 - ▶ **Datos Entrada afectados:** cantidades estadísticas.
 - ▶ **Solución numérica:** media, intervalos de confianza, función distribución.

Parámetros estocásticos en la Simulación de tsunamis generados por avalanchas. ratio de densidades, fricción entre capas, ángulo de fricción,...



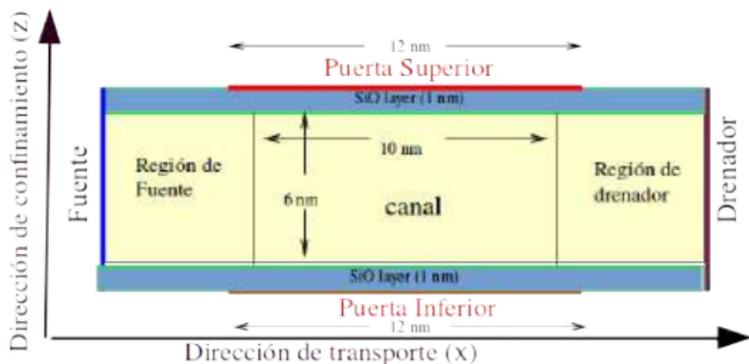
Métodos Estocásticos de Volúmenes Finitos

- ▶ **Idea:** Construir un esquema de volúmenes finitos determinista definido tanto en el espacio físico y en el espacio estocástico.



Objetivo: Simulación numérica altamente precisa de dispositivos semiconductores 2D (DG-MOSFET) a nanoescala.

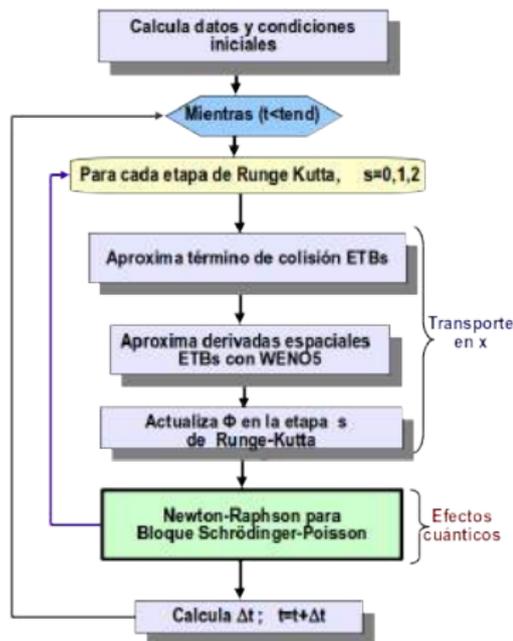
- ▶ Implementación de esquemas deterministas basados en la Ecuación de Boltzmann para Transporte de Carga (ETB).
 - ▶ **Importantes ventajas sobre los métodos MonteCarlo**
 - ▶ **Principal Inconveniente:** Elevado coste computacional debido a la alta dimensionalidad y los métodos numéricos requeridos.
-
- ▶ **Transporte de Electrones:**
Se resuelve en la dirección longitudinal x , resolviendo una ETB para cada valle (3 valles) y subbanda (6). Cada ETB requiere evaluar un operador de colisión.
 - ▶ **Efectos cuánticos:** Se ha de resolver la Ecuación de Schrödinger para la dirección más corta (z).



Simulación acelerada de nano-semiconductores. Implementación de los esquemas numéricos

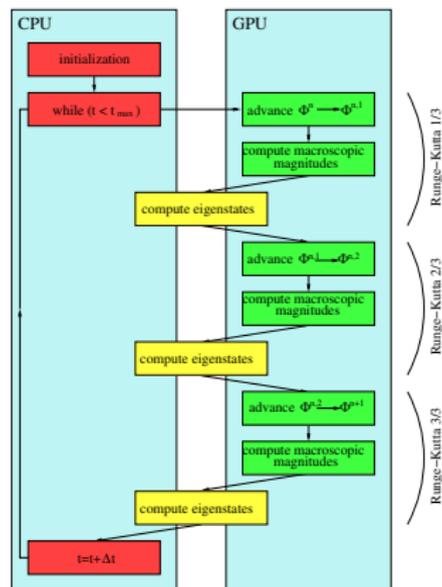
Implementación paralela en MPI del simulador numérico.

- ▶ **Derivadas espaciales:** se resuelven usando Esquemas de diferencias finitas de alto orden WENO5.
- ▶ **Términos de colisión:** Integración numérica.
- ▶ **Bloque Schrödinger-Poisson:** Iteración de Newton-Raphson.
 - 1 **Construir Sistema Lineal:** Matriz muy dispersa.
 - 2 **Precondicionamiento:** Crout Incomplete LU (ILUC).
 - 3 **Resolución iterativa:** Induced Dimension Reduction (IDR).
 - 4 **Diagonalización de Schrödinger:** Cientos de problemas de valores y vectores propios con matrices tridiagonales simétricas.



Simulación acelerada en GPUs de semiconductores nano-escala. Trabajo en Progreso

Objetivo: Adaptación eficiente de fases de cómputo a CPU-GPU



Situación actual:

- 1 **Transporte en x:** Adaptado a GPU (CUDA).
- 2 **Bloque Schrödinger-Poisson:** Implementación híbrida CUDA-OpenMP.

