



МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В ВЕЩЕСТВЕ НА ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

М.Е.Жуковский, С.В.Подольяко, Р.В.Усков,
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Модели и алгоритмы моделирования переноса электронов

The logo for MCNP (Monte Carlo N-Particle) consists of the letters 'mcnp' in a bold, blue, sans-serif font.The logo for Geant4 Associates International features the word 'Geant4' in a large, stylized, black font. A red horizontal line with a red dot at its right end passes through the '4'. To the right of 'Geant4', the words 'ASSOCIATES' and 'INTERNATIONAL' are stacked in a smaller, black, sans-serif font. Below this, the tagline 'Experts in Radiation Simulation' is written in a smaller, italicized, grey font.The logo for PENELOPE features a large, bold, yellow letter 'P' followed by the word 'ENELOPE' in a bold, black, sans-serif font.

- Богатое константное обеспечение
- Надежные численные алгоритмы
- Приближенные подходы
- Применимость к однородным областям

Моделирование переноса электронов в объектах сложной разномасштабной структуры, включающей микроструктурные элементы



Отказ от использования приближенных моделей



Моделирование десятков тысяч столкновений



Использование гибридной вычислительной техники

Математическое моделирование переноса электронов

Сложные модели

Метод группировки столкновений,
Модель вложенных траекторий

Теория многократного рассеяния,
Теория потерь энергии (Ландау)

Обилие условных переходов,
Итерационные процедуры

Реализация на кластерах с
традиционной архитектурой

Логически простые модели

Модель индивидуальных
соударений

Использование распределений,
построенных на основе обработки
данных по сечениям

Огромный объем вычислений
(арифметических)

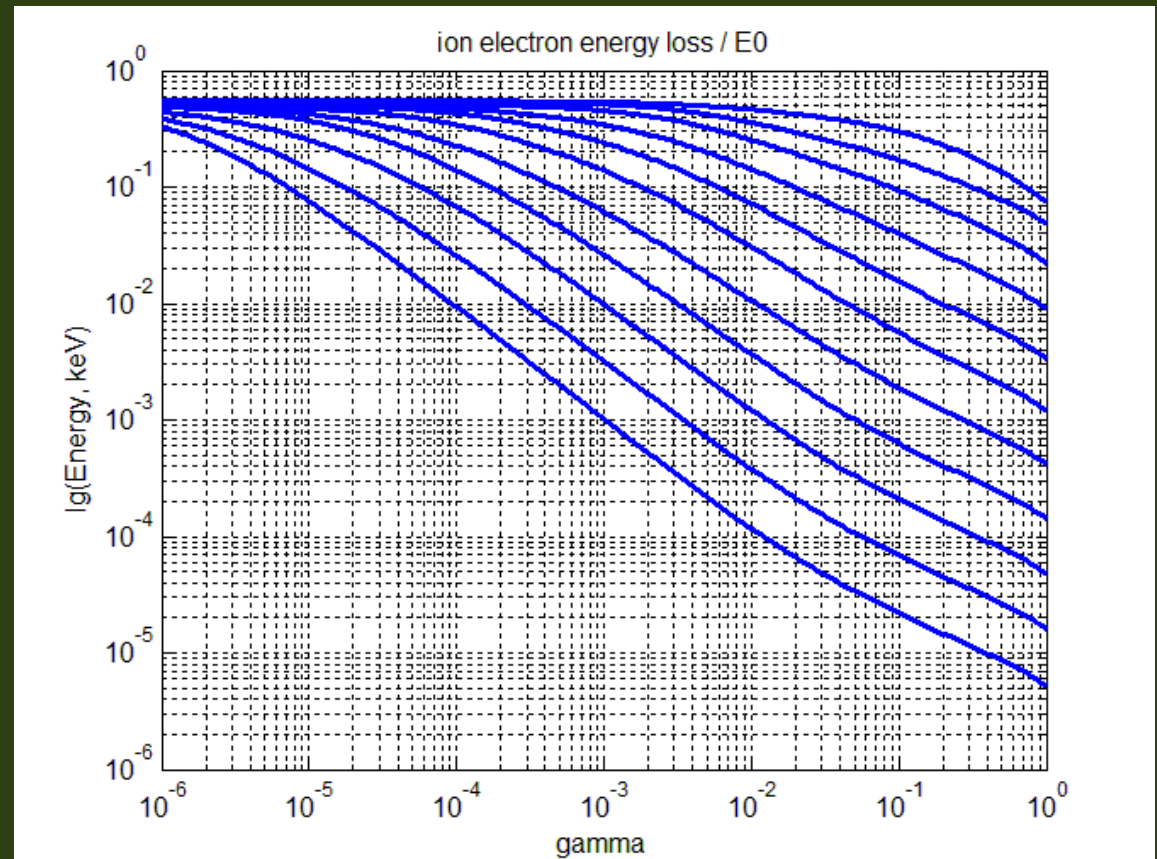
Реализация на кластерах с
гибридной архитектурой

Физическая модель

$$f(x) = \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dx} \quad \sigma = \int \frac{d\sigma}{dx} dx \quad \int_{-\infty}^x f(t) dt = \gamma, \quad \gamma \in (0,1)$$

Пример: распределение потерь энергии при ионизации

- Упругое рассеяние
- Радиационное торможение
- Возбуждение
- Ионизация



Данные по сечениям: Evaluated Nuclear Data File (ENDF, <http://www.nndc.bnl.gov/exfor/endl00.jsp>)

Алгоритм моделирования переноса электронов

- последовательное независимое моделирование случайных траекторий электронов.
- определяется аддитивный вклад каждой траектории в общий результат
- вычислительная схема для каждой траектории одинакова

Итог: высокая пригодность для распараллеливания.

Особенности реализации на графических ускорителях

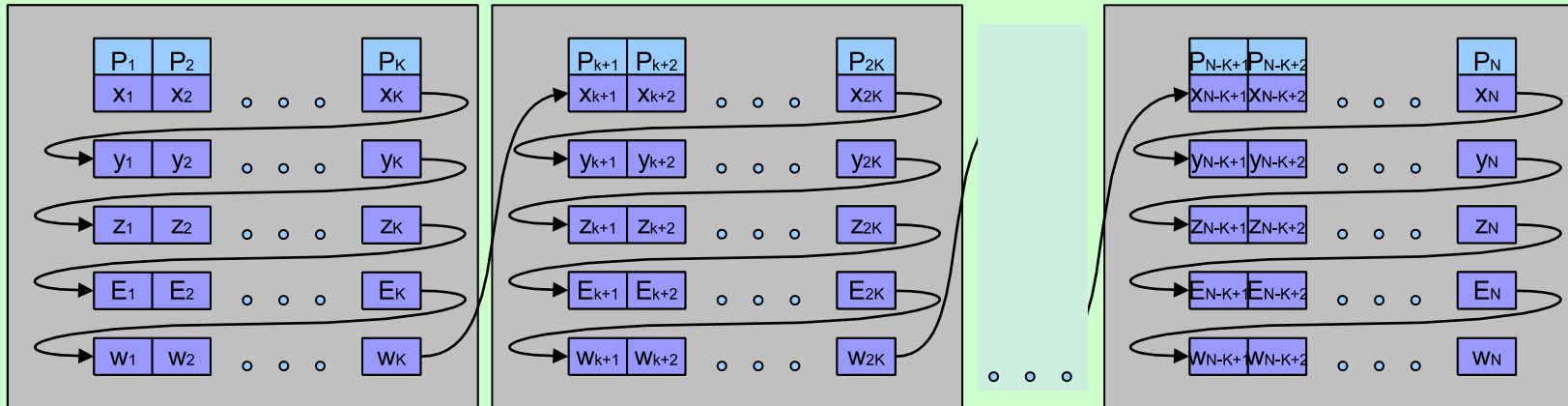
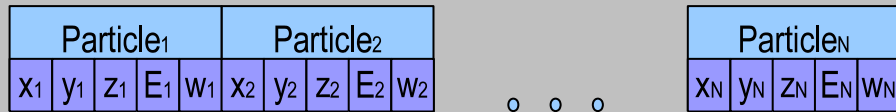
- Отдельные вычислительные потоки моделируют отдельные траектории частиц
- Выделение однородных частей алгоритма в отдельные вычислительные ядра
- Правильная организация и хранение данных
- Использование весовых модификаций метода Монте-Карло

Организация памяти на гибридных системах

Оптимальная для CPU

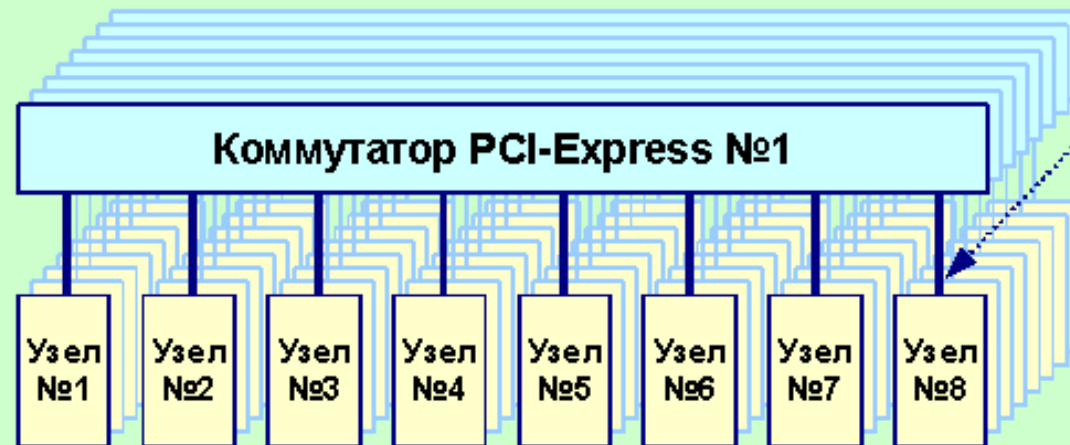
Компромиссная

Оптимальная для GPU



Использование гибридных кластеров (К-100)

Скорость до 700 МБайт/с
Латентность ~ 1.2 мкс
Время выдачи слова ~ 70 нс
Время чтения слова ~ 2.5 мкс



Вычислительный узел

2 x CPU
Intel Xeon X5670

6 ядер на процессоре (12 на узле)
Кэш 12 Мбайт
Частота ядра 2.93 ГГц

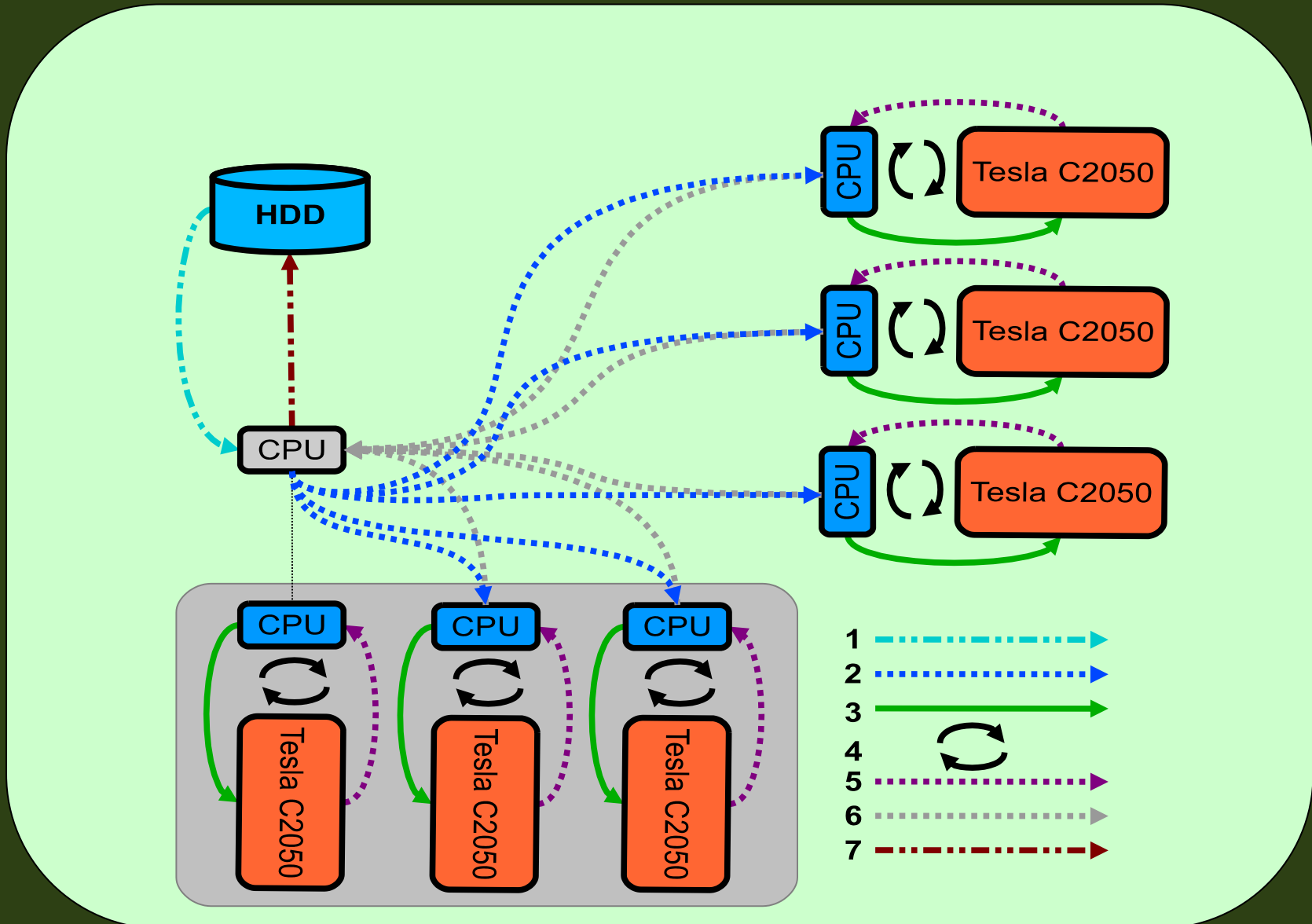
DDR3
SDRAM

DDR3 SDRAM 96 Гбайт

3 x GPU
Fermi C2050

448 ядер CUDA (1344 на узле)
Частота ядра 1.15 ГГц
2,5 Гбайт памяти GDDR5 (7,5 на узле)
Частота памяти 1.5 ГГц
Пропускная способность памяти 144 Гбайт/с

Структура расчетной программы



Пример расчета

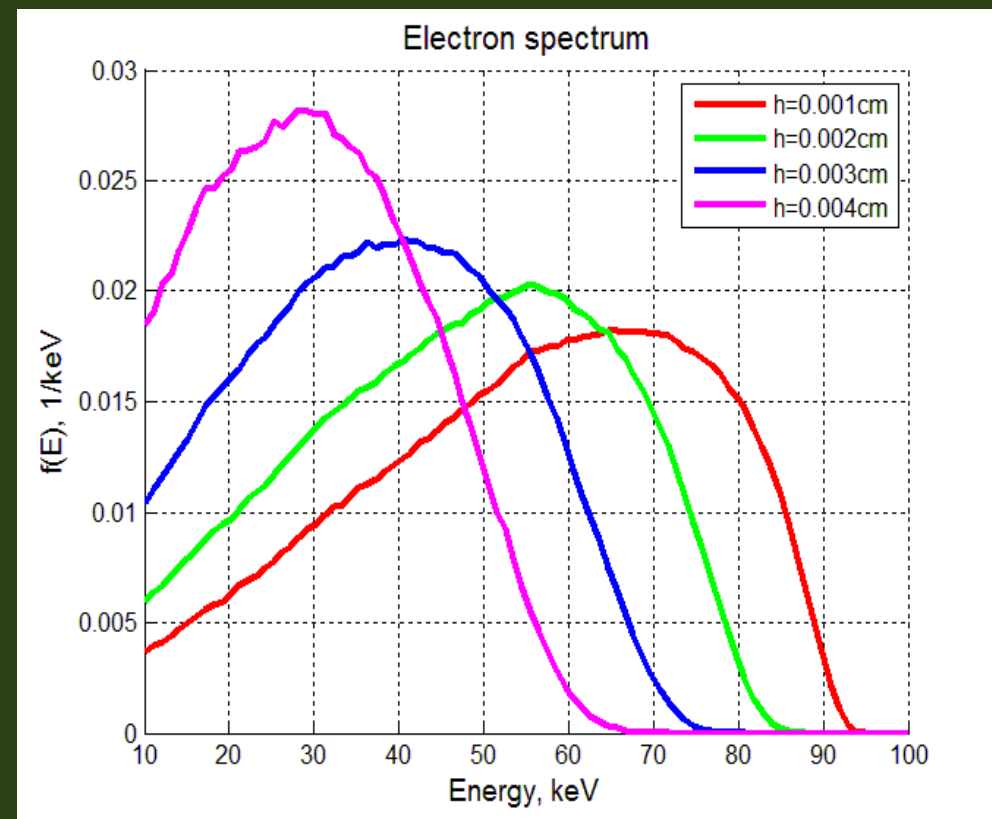
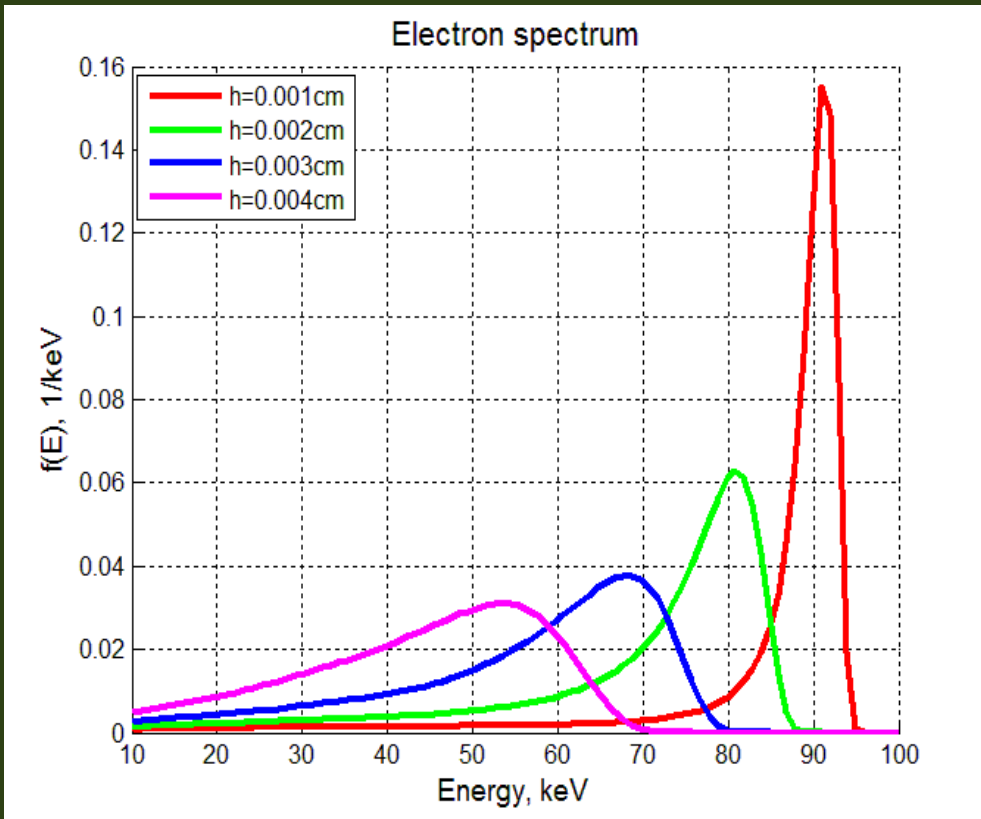
Задача о спектральном распределении электронов в мишени, облучаемой потоком электронов.

по заказу Федерального института исследования и контроля материалов (Берлин, Германия)



Искомая величина – спектры электронов пересекающих детектирующие плоскости в прямом и обратном направлениях

Результаты моделирования



- Совпадение результатов моделирования с MCNP
- Эффективность моделирования на K-100 на два порядка превысила эффективность использования MCNP

Заключение

Анализ результатов моделирования переноса электронов на гибридном суперкомпьютере К-100 и прототипе МВС-Экспресс показал высокую эффективность разработанных методов и алгоритмов моделирования процессов взаимодействия излучения с веществом на компьютерах с гибридной архитектурой.

Ускорение вычислений по сравнению с параллельными системами с обычной линейной архитектурой может достигать двух порядков. Это дает возможность сделать вывод о перспективности суперкомпьютеров с гибридной архитектурой для проведения математического моделирования процессов переноса электронов в веществе.

Спасибо за внимание!

Жуковский М.Е., Подоляко С.В., Усков Р.В. Моделирование переноса электронов в веществе на гибридных вычислительных системах // Вычислительные методы и программирование. 2011. 12, № 1. 152–159.

Жуковский М.Е., Подоляко С.В., Усков Р.В. Модель индивидуальных соударений для описания переноса электронов в веществе // Математическое моделирование. 2011. т.28