



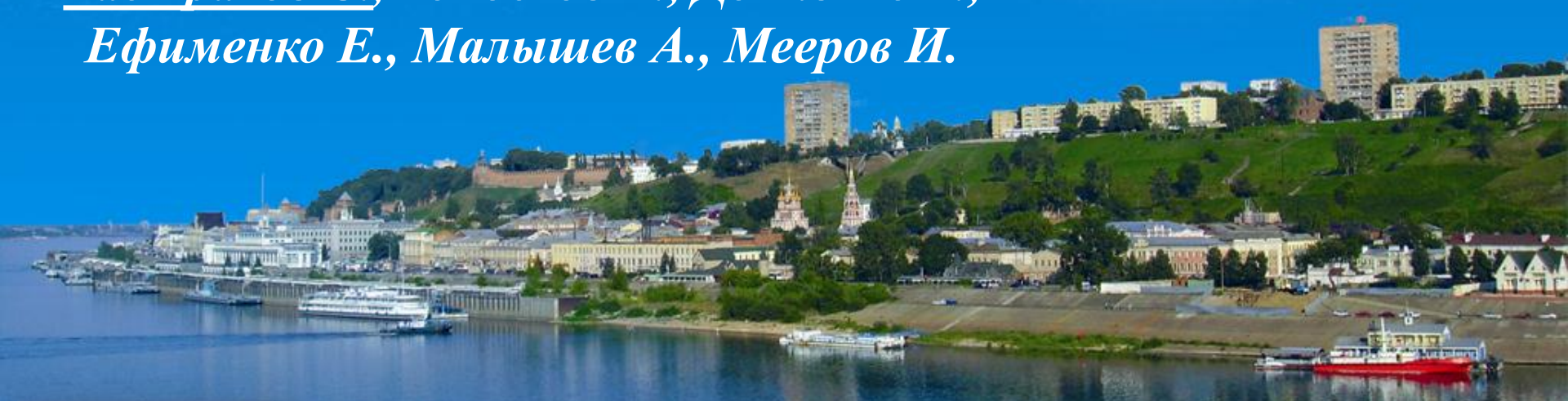
Учреждение Российской Академии Наук
Институт Прикладной Физики РАН



Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского
Национальный исследовательский университет

**ИССЛЕДОВАНИЕ И ПОИСК НАИБОЛЕЕ
ЭФФЕКТИВНЫХ ПУТЕЙ К ПАРАЛЛЕЛЬНОМУ
МОДЕЛИРОВАНИЮ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ
ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ
НА КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМАХ**

*Бастраков С., Гоносков А., Донченко Р.,
Ефименко Е., Малышев А., Мееров И.*



ПаВТ'2011,
31.03.2011

Содержание

- ❑ Постановка задачи
- ❑ Метод частиц в ячейках
- ❑ Параллельная реализация
- ❑ Результаты экспериментов



Предметная область

- ❑ Плазма это полностью или частично ионизованный газ, в котором плотность положительно и отрицательно заряженных частиц почти одинакова.
- ❑ Плазма это не просто набор заряженных частиц, в плазме каждая заряженная частица взаимодействует с большим числом близко расположенных частиц, что приводит к проявлению коллективных эффектов: квазинейтральность, экранировка, плазменные колебания.



Математическая модель плазмы

- Уравнения Максвелла для эволюции электромагнитного поля:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \end{cases}$$

- Ансамбль заряженных частиц, создающих и двигающихся под действием электромагнитного поля.

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = q \left(\vec{E}(\vec{r}) + \frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{B}(\vec{r})) \right) \\ \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} \left(1 + \left(\frac{\vec{p}}{mc} \right)^2 \right)^{-1/2} \end{cases}$$

$$\vec{j}(x, y, z) = \sum_{\text{particles}} q_i \vec{v}_i \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(z - z_i)$$



Актуальность

- Актуальность темы обусловлена актуальностью прикладных задач:
 - ускорение заряженных частиц (адронная терапия, производство короткоживущих изотопов, протонография, источники гамма-излучения);
 - генерация излучения в труднодоступных диапазонах;
 - генерация аттосекундных импульсов для исследования внутримолекулярной динамики на сверхкоротких временных и пространственных масштабах (аттофизика);
 - генерация импульсов предельно высокой интенсивности.



Область исследований

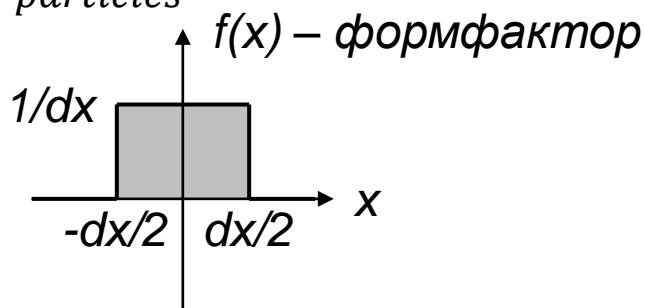
- Направления исследований в области численного моделирования плазмы:
 - разработка более совершенных алгоритмических схем моделирования физических процессов;
 - разработка новых подходов для эффективного использования современных вычислительных систем.
- Для многих прикладных задач (в 3D геометрии) требуется $\sim 10^7 - 10^9$ ячеек пространственной сетки, $\sim 10^7 - 10^{10}$ частиц, обычно используются $\sim 10^2 - 10^4$ вычислительных ядер.
- Один из основных методов расчета – **метод частиц в ячейках** (*Particle-in-Cell, PIC*).
- **Цель проекта** – *поиск путей для эффективной реализации метода частиц в ячейках на кластерных системах.*



Метод частиц в ячейках

- Ансамбль частиц представляется меньшим числом «крупных» частиц. «Крупная» частица – виртуальное объединение некоторого числа частиц для уменьшения объема вычислений, имеет то же отношение заряда к массе → то же уравнение движения. Создаваемая плотность тока/заряда представляется распределенной в пространстве.

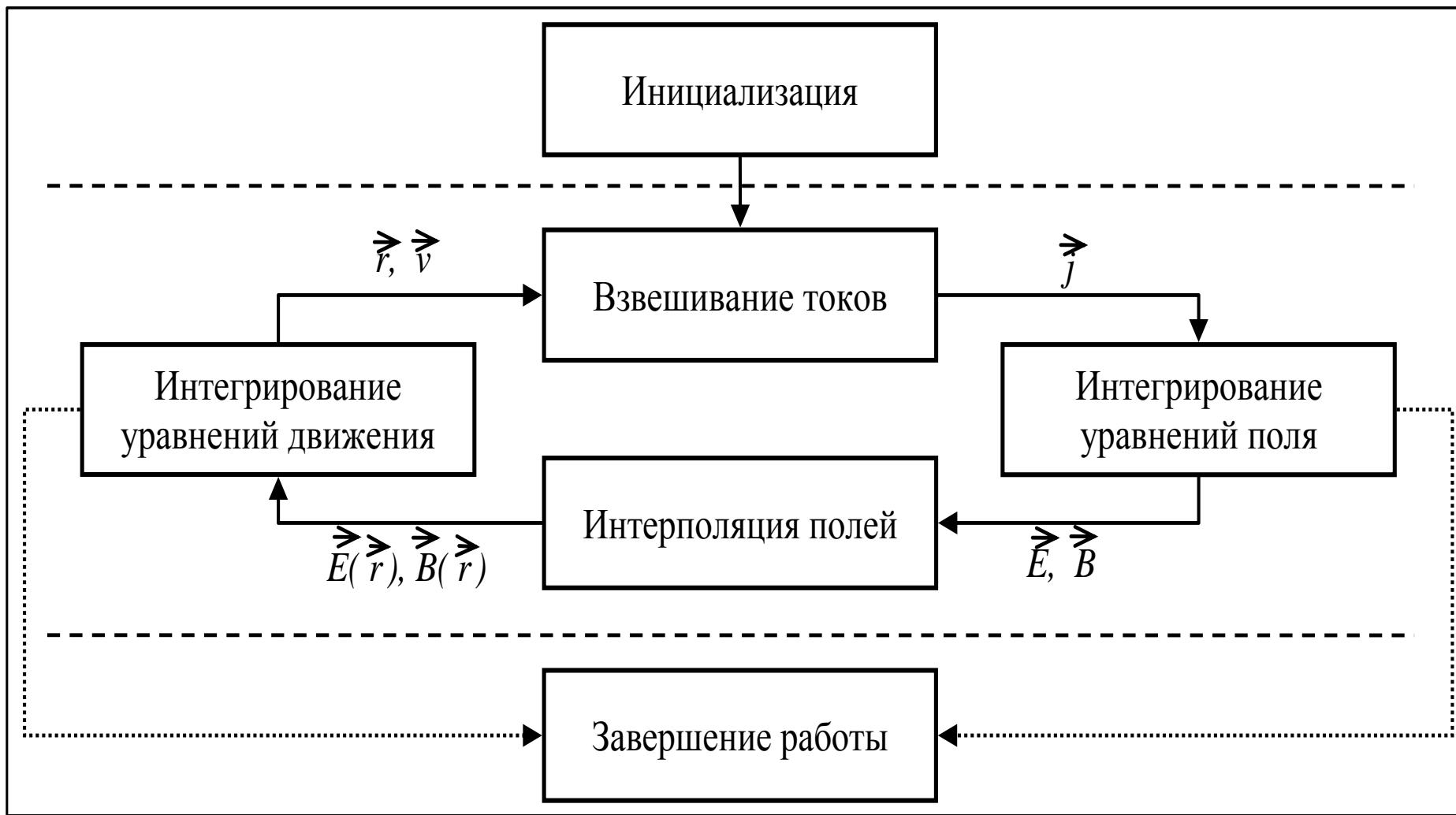
$$\vec{j}(x, y, z) = \sum_{\text{particles}} q_i \vec{v}_i f(x - x_i) f(y - y_i) f(z - z_i)$$



- Частицы взаимодействуют через электромагнитное поле, заданное на пространственной сетке.



Вычислительная схема

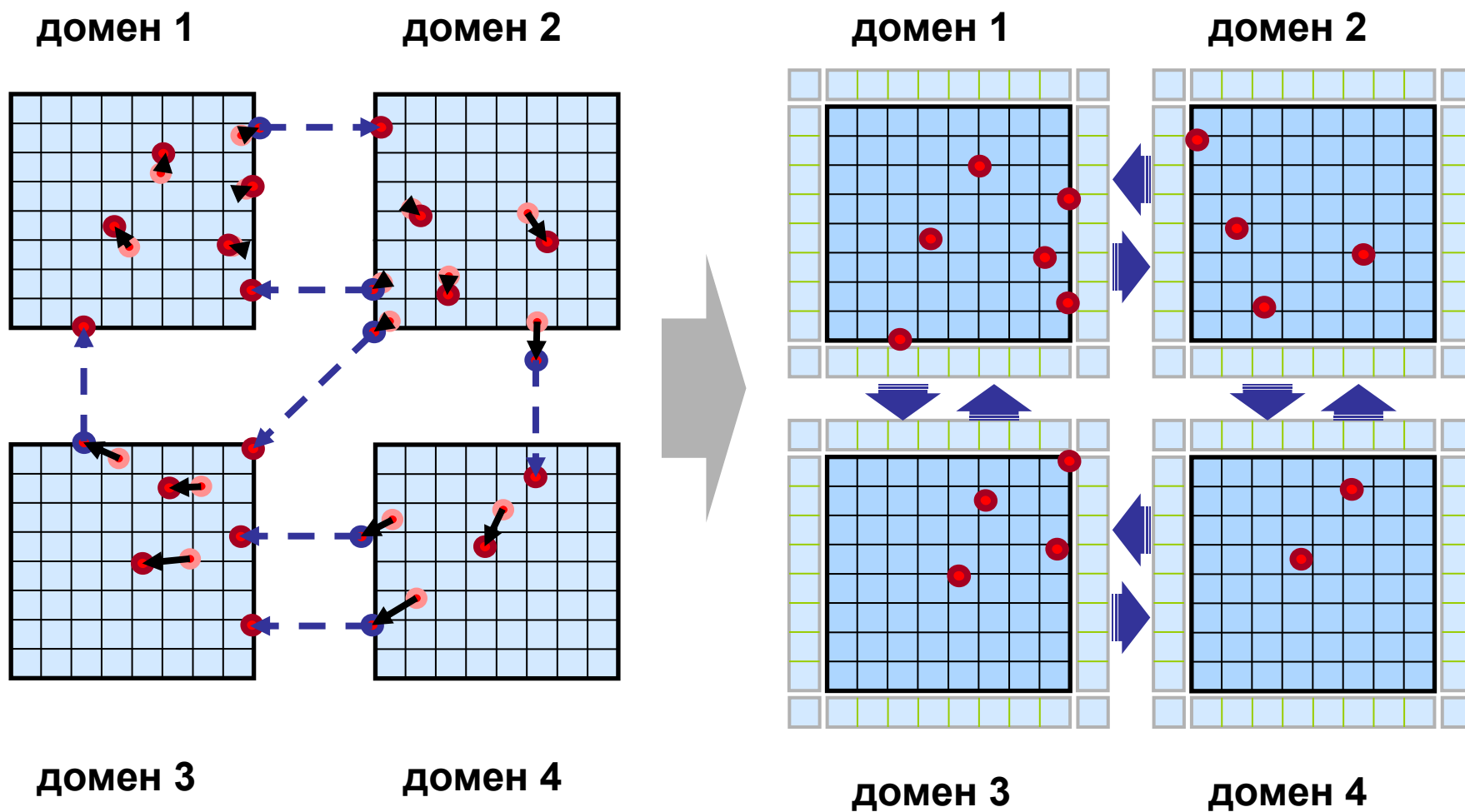


Параллельная реализация

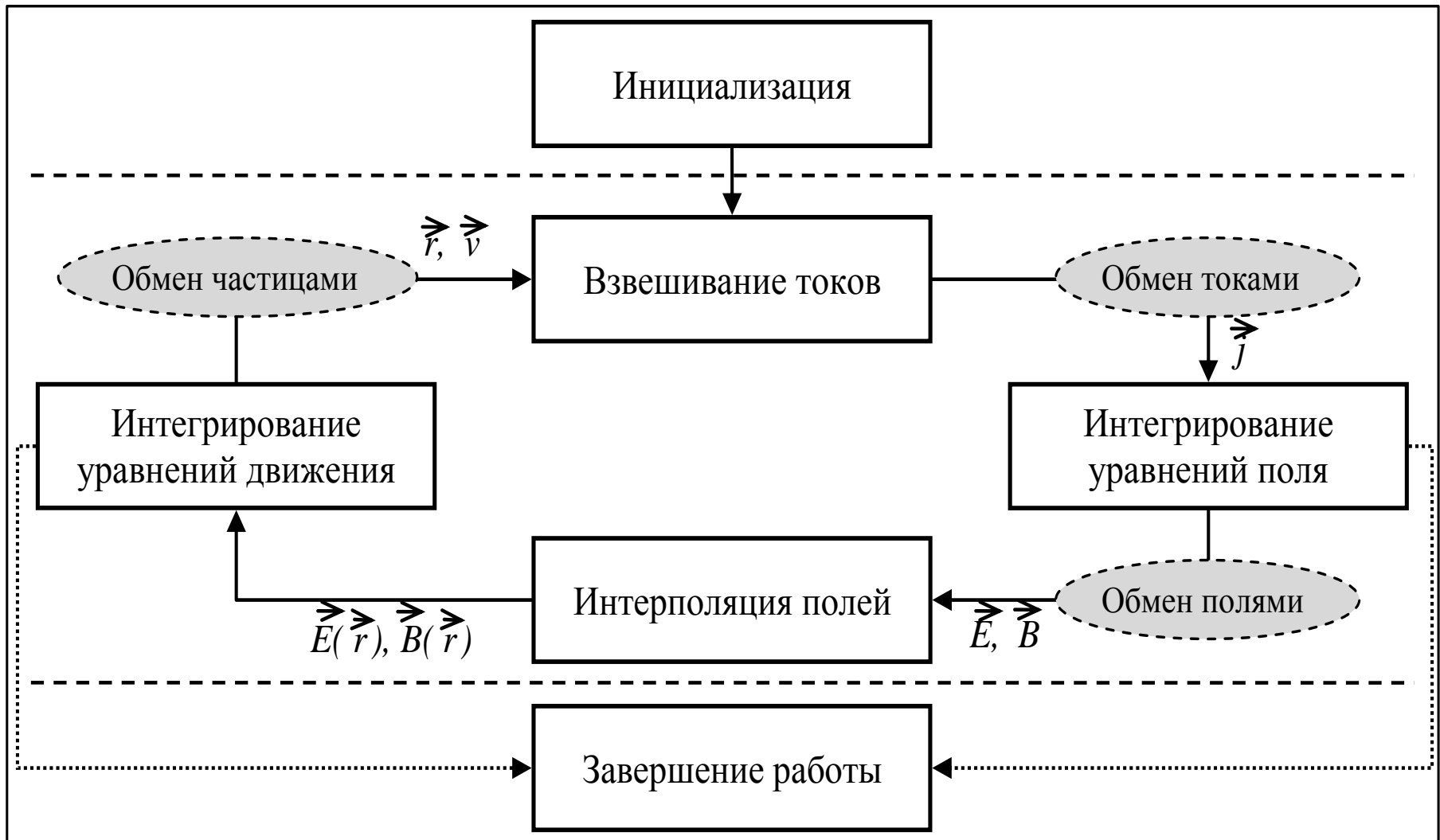
- ❑ Разбиение расчетной области на подобласти (домены) равного размера, операции над которыми выполняются параллельно.
- ❑ Каждый домен содержит сеточные данные и набор частиц, попадающих в соответствующую подобласть.
- ❑ Перекрытие по данным с соседними доменами.
- ❑ Поддержание актуальности данных за счет обменов данными с соседними доменами на каждой итерации.



Параллельная реализация

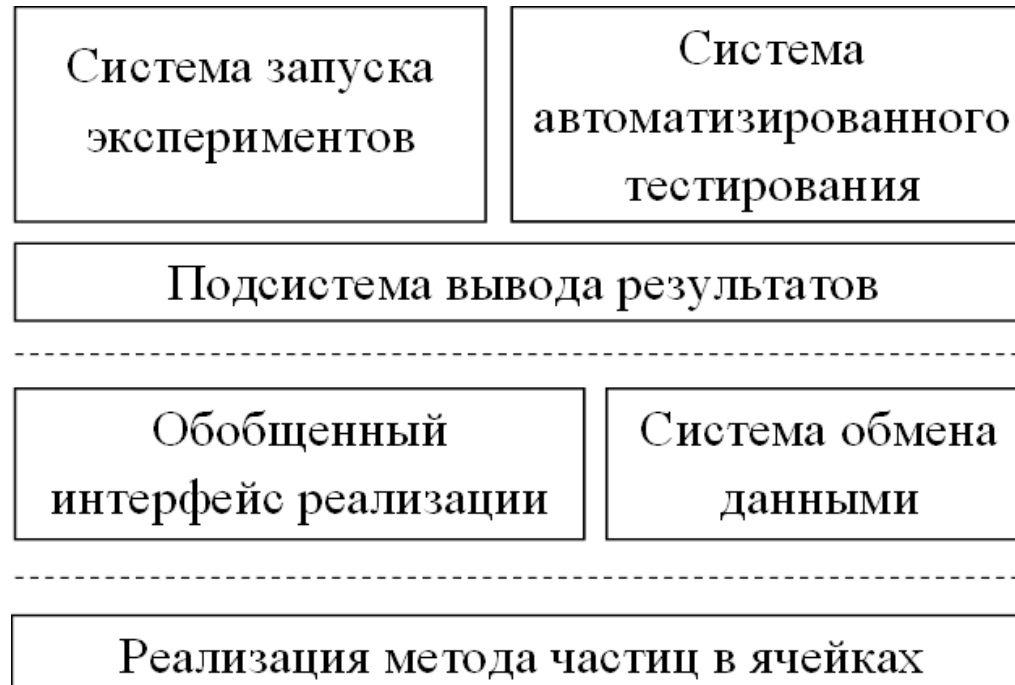


Параллельная вычислительная схема



Программная реализация

- Инфраструктура созданного программного комплекса:



- Используемые средства параллельного программирования: MPI, OpenMP.
- Используемые сторонние средства: HDF5, Tcl, Google Test Framework, muParser.



Масштабируемость на кластерных системах

- ❑ Задача: 16 777 216 ячеек сетки, 503 316 480 частиц.
- ❑ Инфраструктура: суперкомпьютер «МВС-100К», узлы из 2х Intel Xeon E5450, 8 ГБ RAM, Infiniband DDR, CentOS 5.4 x86_64, компилятор Intel.
- ❑ MPI-процесс на каждое ядро процессора, OpenMP отключен.

	Число процессов			
	512	1024	2048	4096
Время вычислений, сек.	1136,2	558,0	273,0	127,6
Время обмена данными, сек.	151,8	121,8	180,3	431,5
Общее время работы, сек.	1288	679,8	453,3	559,1
Эффективность относительно 512 процессов		94,7%	71,0%	28,8%



Масштабируемость на кластерных системах

□ Распределение времени вычислений и обменов данными:

	Число процессов			
	512	1024	2048	4096
Время вычислений, сек.:	1136,2	558,0	273,0	127,6
взвешивание токов	344,9	174,2	78,2	31,8
интегрирование уравнений полей	5,2	2,1	1,1	0,5
интерполяция полей + интегрирование уравнений движения частиц	786,1	381,7	193,7	94,3
Время обмена данными, сек.:	151,8	121,8	180,3	431,5
обмен токами	66,9	34,2	59,0	85,1
обмен полями	32,7	40,8	36,4	159,8
обмен частицами	52,2	46,8	84,9	186,6



Масштабируемость на системах с общей памятью

- Задача: 216 000 ячеек сетки, 6 480 000 частиц.
- Инфраструктура: 2x Intel Xeon E5520 (4 ядра, 2.27 ГГц), 16 ГБ RAM, Windows 7 64 bit, компилятор Microsoft.

	Число потоков/процессов				
	1	2	4	6	8
Время работы OpenMP-версии, сек.	323,8	182,9	108,5	88,0	76,7
Эффективность OpenMP-версии		88,5%	74,6%	61,4%	52,8%
Время работы MPI-версии, сек.	328,5	174,6	103,9	81,6	71,8
Эффективность MPI-версии		94,0%	79,0%	67,1%	57,2%

- Причина плохой масштабируемости – неэффективное использование кэша. Эффект не масштабируется при использовании нескольких узлов кластера.



Выводы

- ❑ Создана параллельная реализация метода частиц в ячейках для кластерных систем и инфраструктура для запуска экспериментов и тестирования.
- ❑ Проведены вычислительные эксперименты с использованием до 4096 MPI-процессов. На 512 процессах время обмена данными составляет 15% от общего времени работы, начиная с 2048 процессов эффективность резко падает.
- ❑ Планы дальнейшего развития:
 - улучшение масштабируемости MPI-версии за счет использования асинхронных обменов;
 - улучшение масштабируемости на системах с общей памятью;
 - расширение функциональности.



Литература

- *Бэдсел Ч., Ленгдон А.* Физика плазмы и численное моделирование: Пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 452 с.
- *Taflove A.* Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. – London: Artech House, 1995. – 599 P.



Приложения



Результаты масштабируемости

- Инфраструктура: кластер ННГУ, 2x Intel Xeon 5150 (2.66 ГГц), 4 ГБ RAM, Gigabit Ethernet, Windows Server 2008 Standard SP1 x64, компилятор Microsoft.
- Задача: 262 144 ячеек сетки, 7 864 319 частиц.

Количество процессов	1	2	4	8	16	32	64
Количество узлов	1	1	1	2	4	8	16
Вычисления, сек.	3902	1987	985	489	242	123	68
Передача, сек.	259	208	167	87	46	24	13
Итого, сек.	4161	2196	1152	576	289	148	81
Ускорение		1,90	3,61	7,22	14,39	28,06	50,94
Эффективность, %		94,76	90,25	90,25	89,95	87,70	79,59



Предметная область. Лазерные технологии

- ❑ Лазерные технологии позволяют получать в настоящее время лазерное излучение с максимальной интенсивностью до 10^{22} Вт/см², что соответствует напряженности поля 10^{12} - 10^{13} В/см, при такой огромной напряженности разность потенциалов на 1 см составит 1ТВ.
- ❑ Необходимо уметь организовать эффективное взаимодействие сверхсильных полей с веществом.
- ❑ Пробой диэлектриков (стекло, вода...) достигается уже при интенсивностях 10^{11} - 10^{12} Вт/см², газа до 10^{14} Вт/см².
- ❑ При этом происходит ионизация вещества, образуется плазма, т. е. происходит смена фазового состояния вещества, сопровождающаяся резким изменением характеристик и часто взрывообразным разрушением материала.
- ❑ В плазме взаимодействие может идти при значительно более высоких напряженностях поля, в сравнении с обычным веществом.



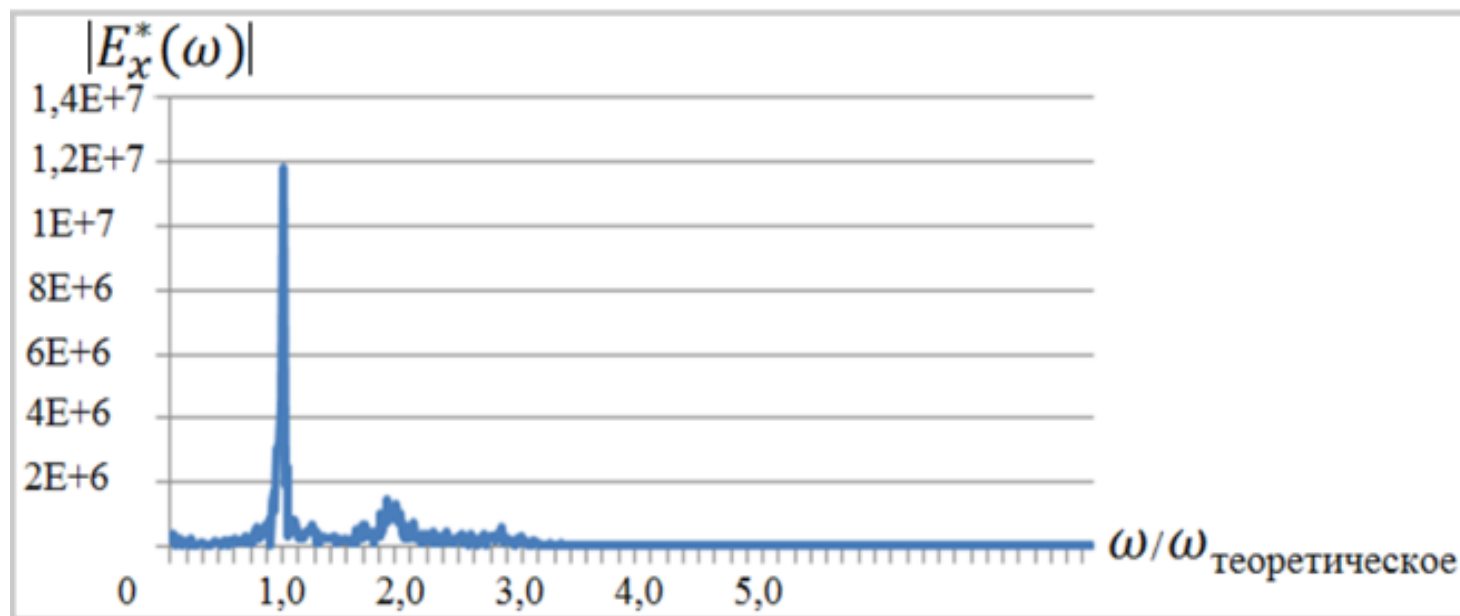
Обзор существующих реализаций

- Используемые архитектуры и технологии:
 - x86 CPU/GPU/CellBE.
 - MPI/OpenMP/CUDA.
- Значимые программные реализации PIC:
 - VPIC (Los Alamos National Lab): MPI + IBM Cell.
 - VLPL (Max-Planck-Institut für Quantenoptik): MPI.
 - OSIRIS (UCLA): Cray T3E.
 - PIConGPU (Dresden): MPI + GPU.



Результаты экспериментов (корректность)

- Набор тестовых задач с известным аналитическим решением.
- Одна из тестовых задач – Ленгмюровские колебания двухкомпонентной плазмы.

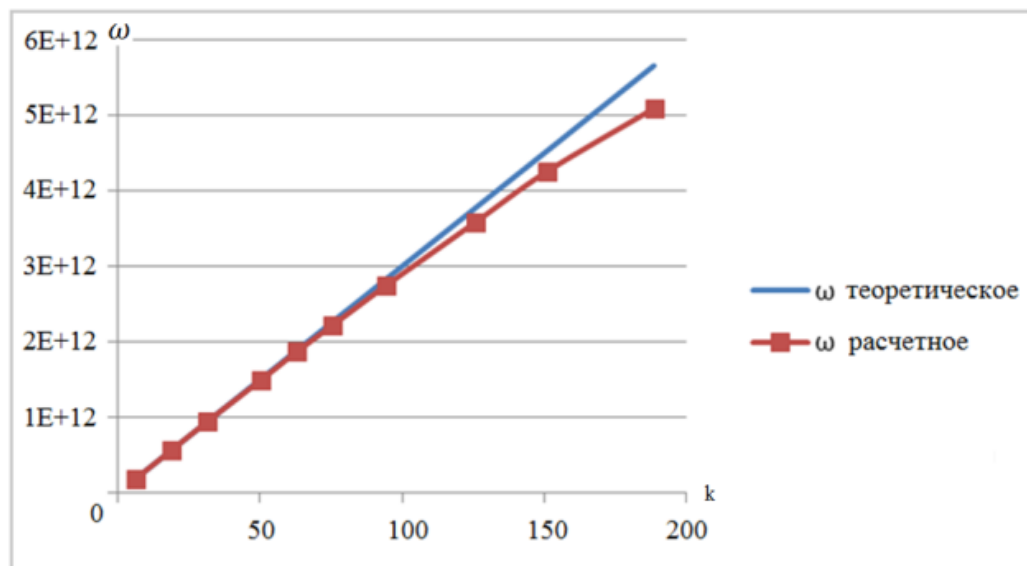


Относительное отклонение максимума спектра от теоретического значения частоты: **2.8%**.



Результаты экспериментов (корректность)

Распространение электромагнитной волны в вакууме:



Отличие от аналитического результата при больших значениях волнового числа является известным для метода FDTD следствием недостаточно малого шага сетки по сравнению с характерными масштабами физического процесса.



Результаты экспериментов (корректность)

- Релятивистское ускорение в статическом электрическом поле. Относительная ошибка по сравнению с аналитическим решением:
 - $8e-2\%$ для координаты;
 - $1e-4\%$ для импульса.

- Осцилляция в статическом магнитном поле. Относительная ошибка по сравнению с аналитическим решением:
 - $1e-2\%$ для координаты;
 - $3e-6\%$ для импульса.

