

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ НА ГЕТЕРОГЕННЫХ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМАХ

*С.И. Бастраков¹, А.А. Гonosков², Р.В. Донченко¹, Е.С. Ефименко², А.С. Малышев¹,
И.Б. Мееров¹*

¹Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского

²Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород

Рассматривается задача разработки программного обеспечения, предназначенного для моделирования плазмы методом частиц в ячейках (Particle-in-Cell) на гетерогенных кластерных системах. Приводится описание текущей реализации и результаты вычислительных экспериментов, характеризующие эффективность и масштабируемость.

Введение

Одной из востребованных в настоящее время областей численного моделирования физических процессов является моделирование динамики плазмы и взаимодействия мощных лазерных импульсов с различными мишенями. В числе важных приложений можно выделить создание компактных источников для адронной терапии при лечении онкологических заболеваний, создание фабрик короткоживущих изотопов для биоимиджинга, разработку приборов для исследования внутримолекулярных и внутриатомных процессов.

Часто, в связи с высокой степенью нелинейности и геометрической сложностью задачи, исследование динамики плазменных структур основывается на моделировании плазмы методом частиц в ячейках (Particle-in-Cell) [2]. Основная специфика метода частиц в ячейках заключается в одновременной обработке принципиально разнородных массивов данных, содержащих информацию о координатах и скоростях заряженных частиц плазмы, и об электромагнитном поле, заданном в узлах дискретной решетки, представляющей часть трехмерного пространства. Отсутствие однозначных путей упорядочивания обращений к памяти обуславливает сложность эффективной программной реализации, как для классических кластерных вычислительных систем, так и для гетерогенных систем с использованием графических процессоров. Применение метода для решения прикладных задач часто требует использования суперкомпьютерных технологий – известны задачи, требующие моделирования динамики $\sim 10^9$ и более частиц в пространстве, представленном $\sim 10^8$ ячеек.

Целью настоящей работы является представление текущих результатов, полученных в рамках проекта, направленного на поиск и реализацию наиболее эффективных подходов к параллельному моделированию плазмы методом частиц в ячейках на гетерогенных кластерных системах.

1. Постановка задачи

Подход к моделированию плазмы методом частиц в ячейках основан на математической модели, в рамках которой плазма представляется ансамблем отрицательно заряженных электронов и положительно заряженных ионов, создающих и двигающихся под действием электромагнитных полей. Движение заряженных частиц описывается в рамках классических релятивистских уравнений движения:

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

где m , q , $\vec{r}$, $\vec{p}$ и $\vec{v}$ – масса, заряд, координаты в трехмерном пространстве, импульс и скорость частицы соответственно; $\vec{E}$, $\vec{B}$ – векторы напряженности электрического и магнитного полей в точке нахождения частицы соответственно; $c \approx 2,998 \times 10^{10}$ см/с – скорость света. Эволюция электромагнитного поля ($\vec{E}$, $\vec{B}$) описывается в рамках уравнений Максвелла, в которые также входит векторное поле плотности тока $\vec{j}$, создаваемое частицами:

$$\text{rot } \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad \text{rot } \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}.\tag{2}$$

Метод частиц в ячейках предполагает представление всего ансамбля частиц эквивалентным меньшим числом так называемых крупных частиц, имеющих такое же отношение заряда к массе, как у реальных частиц. Поскольку заряд и масса частицы входят в уравнения движения (1) только в виде отношения, такое представление обеспечивает полностью эквивалентную динамику плазмы в случае, если число крупных частиц достаточно велико.

2. Метод решения

Расчетная область покрывается равномерной пространственной сеткой. Электрическое поле $\vec{E}$ и плотность тока $\vec{j}$ представляются значениями в узлах сетки, магнитное поле $\vec{B}$ – значениями в центрах ячеек сетки. Также хранятся данные о наборе частиц, каждая частица определенного типа характеризуется положением и скоростью. Масса и заряд определяются типом частицы.

Используется классическая схема метода частиц в ячейках [1], включающая следующие этапы: инициализация, вычислительный цикл (взвешивание токов, интегрирование уравнений поля, интерполяция полей, интегрирование уравнений движения частиц), завершение работы. Каждая итерация вычислительного цикла соответствует одному шагу по времени.

На этапе инициализации выполняются следующие подготовительные работы: чтение и интерпретация исходных данных, создание и инициализация необходимых структур данных. Взвешивание токов состоит в определении сеточных значений плотности тока $\vec{j}$ по известным положениям и скоростям частиц. Каждая частица вносит вклад в значение плотности тока только в 8-ми ближайших к ней узлах сетки; для получения итоговых значений вклады всех частиц суммируются [2]. Далее выполняется шаг численного интегрирования уравнений Максвелла (2) по времени, определяются новые сеточные значения электрического и магнитного полей; используется метод FDTD [3]. На следующем этапе проводится линейная интерполяция сеточных значений электрического и магнитного полей для точек нахождения частиц; для получения каждого значения используются 8 ближайших сеточных значений. Интерполированные значения полей используются при интегрировании уравнений движения частиц (1); для интегрирования применяется метод Boris по описанию в [1].

3. Параллельная реализация для гетерогенного кластера

Параллельная реализация разрабатывается для гетерогенных кластерных систем. Рассматривается случай, когда узлы кластера содержат центральные и графические процессоры. Схема работы следующая:

1. Распределение задачи по узлам вычислительного кластера осуществляется при помощи интерфейса MPI.
2. На каждом из узлов кластера запускается несколько MPI-процессов. Каждый процесс использует для вычислений либо одно или несколько ядер центральных процессоров, либо один из графических процессоров (или других устройств), либо все устройства совместно.
3. Распараллеливание на ядра центральных процессоров внутри узла проводится при помощи технологии OpenMP. Код для графических процессоров реализован при помощи технологии OpenCL.
4. Распределение работы между узлами кластера равномерное, применяется трехмерная декомпозиция. Распределение работы между процессами на одном узле, использующими центральные и графические процессоры, неравномерное.

Декомпозиция задачи осуществляется по территориальному принципу: расчетная область разбивается на подобласти (домены), операции над которыми выполняются параллельно различными MPI-процессами. Процесс, на котором проводятся операции над определенным доменом, хранит данные об электромагнитных полях и данные о частицах, находящихся в соответствующей части физического пространства. Данные, относящиеся к узлам, попадающим на границы между двумя или более доменами, хранятся на всех вычислительных узлах, обрабатывающих такие домены. Кроме того, вычислительный узел хранит данные о магнитных полях в центрах ячеек, граничащих с обрабатываемым им доменом. На рис. 1 приведен пример разбиения расчетной области на домены и соответствие доменов устройствам на узле гетерогенного кластера.

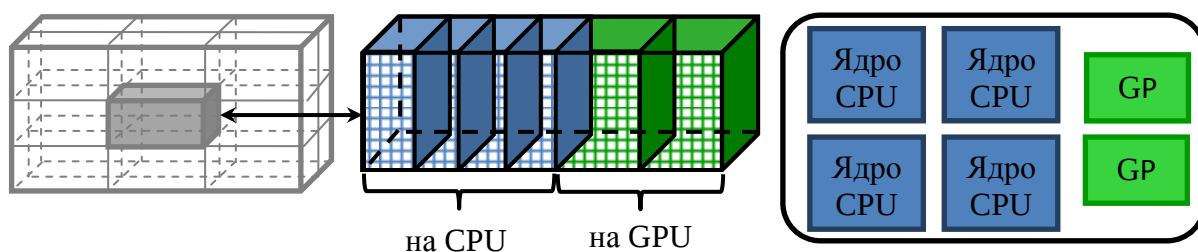


Рис. 1. Разбиение расчетной области на домены и соответствие доменов устройствам на гетерогенном кластере

Операции параллельной обработки внутренних частей доменов выполняются полностью аналогично последовательной версии. Для поддержания актуальности данных во всех доменах используются обмены данными о токах, полях и частицах. Схема организации обменов показана на рис. 2.

4. Результаты экспериментов

Для анализа корректности реализации метода частиц в ячейках использован набор тестовых задач, соответствующие результаты приведены в [4]. В данном разделе приводятся результаты экспериментов, связанные с оценкой эффективности и масштабируемости реализации для традиционных и гетерогенных кластерных систем.

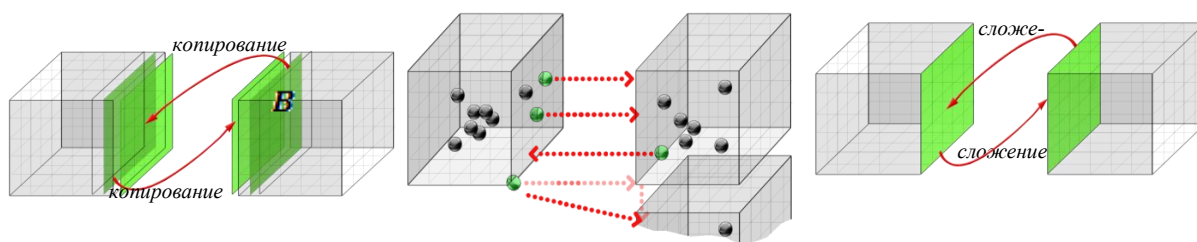


Рис. 2. Организация обменов

Вычислительные эксперименты для определения масштабируемости MPI-версии при использовании только центральных процессоров выполнялись на 2 системах:

1. «MBC-100K» в МСЦ РАН (на каждом узле 2 процессора Intel Xeon E5450 (3 ГГц), 8 ГБ RAM, Infiniband DDR, CentOS 5.6 x86_64).

2. «Akka» в High Performance Computing Center North (на каждом узле 2 процессора Intel Xeon L5420 (2.5 ГГц), 16 ГБ RAM, Infiniband 4x, CentOS 5.6 x86_64).

Рассматривалась тестовая задача моделирования ленгмюровских колебаний плазмы с использованием 503 миллионов частиц, 17 миллионов ячеек пространственной сетки, двойная точность. На каждое ядро создавался отдельный MPI-процесс. Результаты приведены в табл. 1. При использовании 2048 ядер на рассматриваемых системах достигается эффективность 71% и 85% относительно 512 ядер.

Таблица 1. Результаты масштабируемости MPI-версии

	«MBC-100K»				«Akka»		
Число процессов	512	1024	2048	4096	512	1024	2048
Время вычислений, сек	1136	558	273	127	1037	521	248
взвешивание токов	345	174	78	32	344	172	77
интегрирование уравнений полей	5	2	1	1	5	3	1
интегрирование уравнений движения частиц	786	382	194	94	688	346	170
Время обмена данными, сек	152	122	180	432	133	83	97
обмен токами	67	34	59	85	52	18	27
обмен полями	33	41	36	160	29	28	34
обмен частицами	52	47	85	187	52	37	36
Общее время, сек	1288	680	453	559	1170	604	345
Эффективность относительно 512 процессов		94,7%	71,1%	28,8%		96,9%	84,8%

Вычислительные эксперименты для гетерогенного случая выполнены на кластере Нижегородского госуниверситета, включающего 16 узлов, каждый из которых содержит 2 четырехъядерных процессора Intel Xeon L5630 (2.13 ГГц) и 2 графических процессора NVIDIA Tesla X2070, 24 Гб RAM, сетевое соединение Infiniband QDR. Использовался Microsoft HPC Pack 2008 SDK, Microsoft Visual C++ 2008 SP1. Рассматривалась тестовая задача моделирования ленгмюровских колебаний плазмы с использованием 983 тысяч частиц, 33 тысяч ячеек пространственной сетки. Результаты для одинарной и двойной точности приведены в табл. 2, времена обменов между оперативной памятью и памятью GPU включены во времена соответствующих этапов вычислений. В двойной точности при использовании 1 GPU достигает ускорения около 3.1 раз относительно версии с использованием 8 ядер CPU, при использовании 2 GPU – около 4.7 раз. В одинарной точности ускорения при использовании 1 и 2 GPU относительно 8 ядер CPU составляют 4.3 и 5.8 раз соответственно.

Таблица 2. Результаты работы гетерогенной версии

Число процессов	Двойная точность				Одинарная точность			
	1 ядро CPU	8 ядер CPU	1 GPU	2 GPU	1 ядро CPU	8 ядер CPU	1 GPU	2 GPU
Время вычислений, сек	2616	418	125	77	2045	310	66	46
<i>взвешивание токов</i>	439	90	59	32	348	53	26	15
<i>интегрирование уравнений полей</i>	16	3	25	22	15	10	19	18
<i>интегрирование уравнений движения частиц</i>	2161	325	41	23	1682	247	21	13
Время обмена данными, сек	12	16	14	15	11	28	12	12
<i>обмен токами</i>	4	4	4	3	4	3	3	2
<i>обмен полями</i>	4	3	5	4	4	12	4	3
<i>обмен частицами</i>	4	9	5	8	3	13	5	7
Общее время, сек	2628	434	139	92	2056	338	78	58

5. Заключение

Разработана параллельная версия программного обеспечения для численного моделирования плазмы методом частиц в ячейках на гетерогенных кластерных системах. При решении модельных задач данная реализация показывает результаты, соответствующие теоретическим предсказаниям. Проведенные вычислительные эксперименты демонстрируют хорошую масштабируемость параллельной версии, построенной на основе MPI, вплоть до 2048 процессов. Разработанная гетерогенная версия демонстрирует ускорение в 3-4 раза относительно 8 ядер CPU.

Целью дальнейших исследований является увеличение производительности и масштабируемости на CPU и GPU, доработка программной реализации, одновременно использующей все вычислительные устройства, а также реализация улучшенных численных схем.

Работа выполнена в лаборатории «Информационные технологии» ВМК ННГУ при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», госконтракт № 02.740.11.0839.

Литература

1. Hockney R., Eastwood J. Computer Simulation Using Particles. – IOP, Bristol and New York, 1989.
2. Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование: Пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 452 с.
3. Taflove A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. – London: Artech House, 1995. – 599 p.
4. Бастратов С.И., Гоносков А.А., Донченко Р.В., Ефименко Е.С., Малышев А.С., Мереров И.Б. Исследование и поиск наиболее эффективных подходов к параллельному моделированию плазмы методом частиц в ячейках на кластерных системах // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2011): Труды международной научной конференции (Москва, 28 марта–1 апреля 2011 г.) [Электронный ресурс] – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – С. 411-417. – URL: [<http://omega.sp.susu.ac.ru/books/conference/PaVT2011/short/118.pdf>].