



**НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ им. Н. И. ЛОБАЧЕВСКОГО**
Национальный исследовательский университет

ПРОГРАММА ПОВЫШЕНИЯ КОНКУРЕНТОСПОСОБНОСТИ ННГУ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ

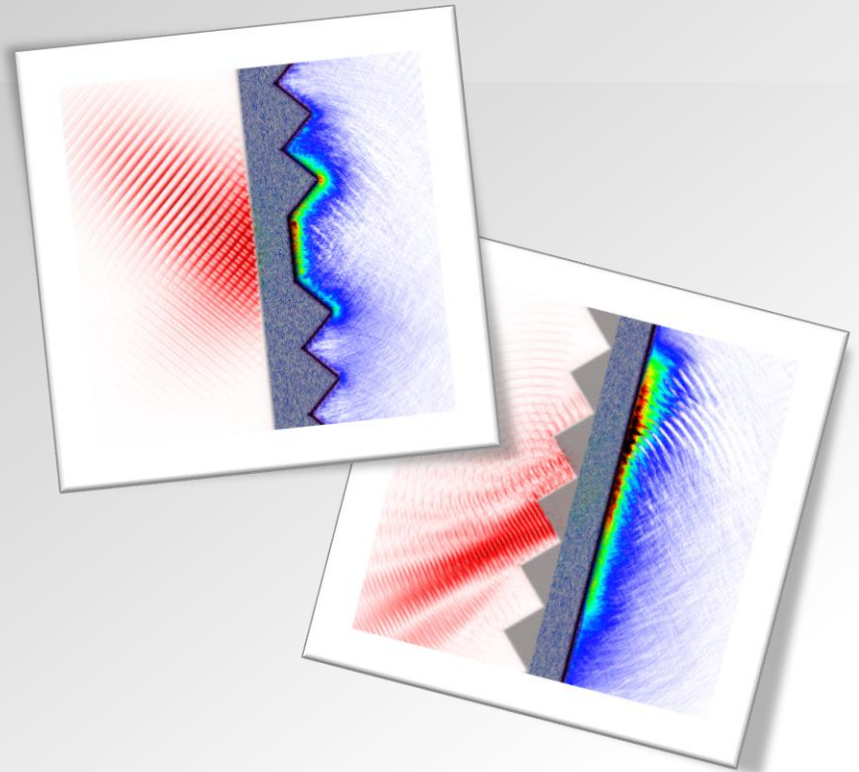
И.Б. Мееров, А.А. Гоносков

ВМК

Нижний Новгород, 6 ноября 2014

Содержание

- Предметная область
- Метод частиц в ячейках
- Код PICADOR
- Производительность
- Целевые задачи
- Публикации
- Команда и международное сотрудничество
- Ключевые достижения
- Планы на будущее



Численное моделирование плазмы...

- **Примеры актуальных прикладных задач:**
 - Ускорение заряженных частиц (адронная терапия, производство короткоживущих изотопов, протонография)
 - Генерация излучения в труднодоступных диапазонах
- **Метод частиц в ячейках (Particle-in-Cell)** – один из наиболее общих и вычислительно эффективных подходов к моделированию плазмы
- Бурное развитие подхода для исследований в области лазерной плазмы:
 - Лазерное ускорение заряженных частиц
 - Источники излучения с уникальными характеристиками
 - Фундаментальные исследования в области строения вещества и вакуума

Численное моделирование плазмы

- Ожидаются революционные продвижения в области адронной терапии, медицинской и промышленной диагностики
- **Область высокопроизводительных вычислений:** для решения многих прикладных задач в 3D-геометрии требуется $\sim 10^8 - 10^{10}$ ячеек сетки, $\sim 10^8 - 10^{10}$ частиц, $10^4 - 10^6$ ядер

Цель: эффективная реализация метода частиц в ячейках на гетерогенных кластерных системах.

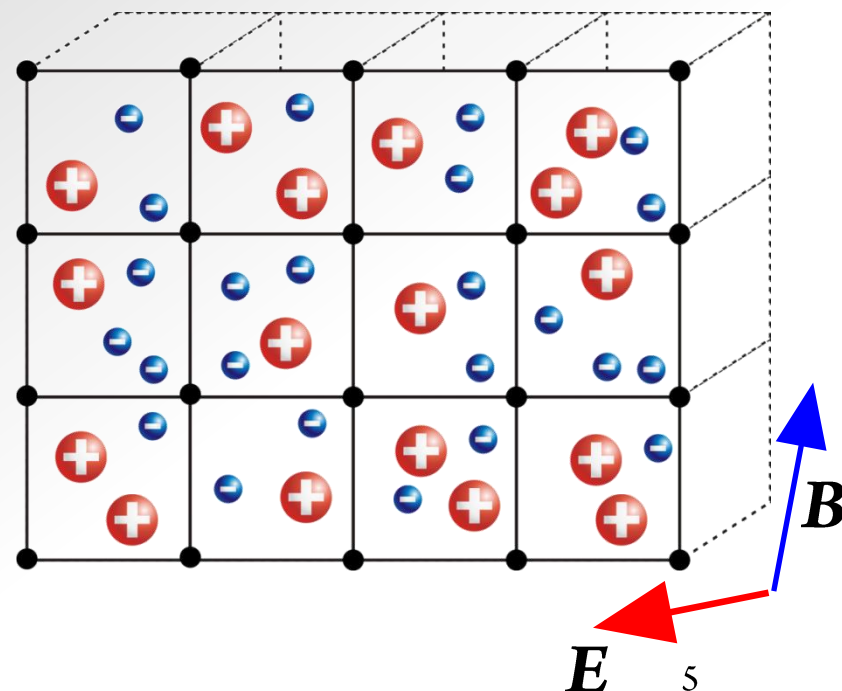
Результат: новый расширяемый программный комплекс мирового уровня.

Метод частиц в ячейках

Плазма – полностью или частично ионизованный газ

- Две основные сущности:
 - Ансамбль заряженных частиц (электроны, ионы)
 - Электромагнитное поле, заданное на сетке
- Нет взаимодействий Частица – Частица
- Взаимодействия Частица – Сетка пространственно локальны

Частица
(r, v, q, m)



E

5

Схема вычислений

**Интегрирование
уравнений поля**

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$\mathbf{E}, \mathbf{B}$



**Интерполяция поля и
вычисление сил**

$$\mathbf{F}_i = q_i \left(\mathbf{E}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{c} \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_i) \right)$$

Движение частиц

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F}_i \qquad \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$

$$\mathbf{v}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \left(1 + \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i c} \right)^2 \right)^{-1/2}$$

$\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i$



$\mathbf{j}$



Взвешивание токов

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_i q_i \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

Обзор реализаций

- **Используемые архитектуры и технологии:**
 - x86 CPU / GPU / Xeon Phi
 - MPI / OpenMP / CUDA
- **Наиболее известные реализации:**
 - OSIRIS (UCLA, ISTU, Португалия)
 - VPIC (Los Alamos, США)
 - VLPL (Германия)
 - PIConGPU (HZDR, Германия)

Широкое использование CPU и GPU.

Большой интерес к Xeon Phi: многообещающие первые результаты, активное развитие.

Код PICADOR...

PICADOR – код для 3D-моделирования плазмы методом частиц в ячейках.

- **Многоуровневая инфраструктура разработки, оптимизации, расширения и эксплуатации кода**
 - Специализированный скриптовый язык управления
 - Модульный интерфейс расширения
 - Средства визуализации
- **Обширный инструментарий** численных методов, подходов к оптимизации параллелизма, модулей физических эффектов и средств визуализации

Код PICADOR...

Поддерживаются наиболее распространенные численные схемы и расширения метода частиц в ячейках:

- FDTD и NDF
- формфакторы CIC и TSC
- схема Езиркепова
- метод Бориса
- PML, генератор
- ионизация
- рождение электрон-позитронных пар

Код PICADOR

- **Уровень производительности близок к лидирующим показателям: 90 нс / обновление частицы**
 - Лидирующий код OSIRIS: 60 нс / обновление частицы (декабрь 2013)
 - Непрофессиональные реализации
~ 1000 нс / обновление частицы
- Ориентация на новейшие архитектуры GPU, Xeon Phi (один из первых проектов в мире)
- Масштабируемость ~ **1000 ядер CPU** (MPI + OpenMP),
~ **100 000 ядер GPU** (MPI + CUDA)
- Разрабатывается с 2010, введен в эксплуатацию с 2014 года (**основной вычислительный инструмент шведского проекта PIONA**)

Направления работ – 2014

- Оптимизация вычислительного ядра; адаптация к GPU и Xeon Phi, тестирование и оценки перспектив их использования *
- Расширение функциональности PICADOR*
- Переход кода в новое качество: от экспериментального образца до программного продукта
- Использование в научных исследованиях
- Расширение сообщества пользователей, привлечение новых коллективов, создание методических материалов, проведение консультаций и семинаров

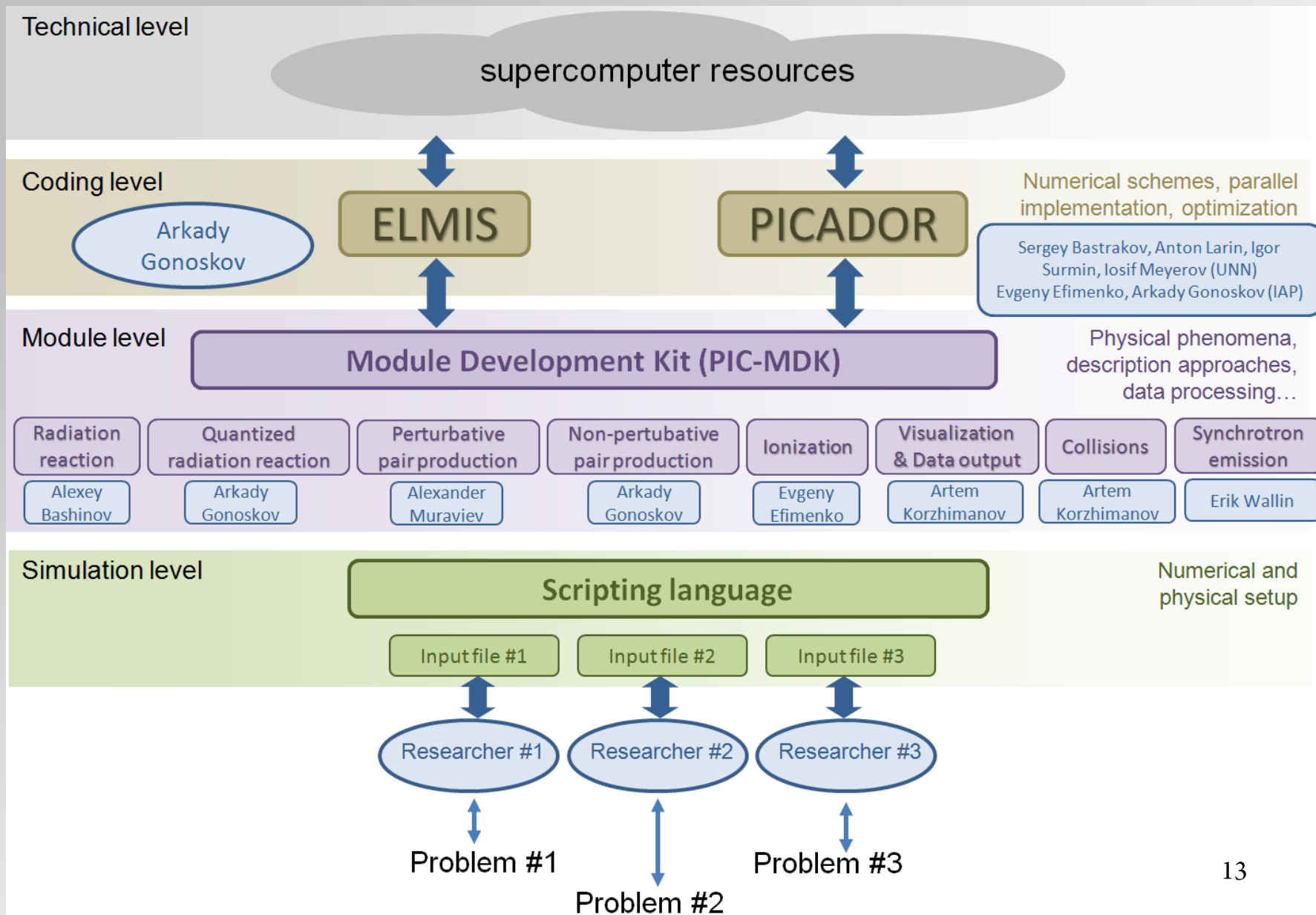
* Частично поддержано грантами РФФИ «Мой первый грант»

Интерфейс PIC-MDK...

Интерфейс PIC-MDK (module development kit)
предназначен для разработки расширений метода

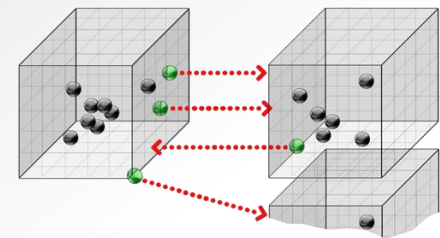
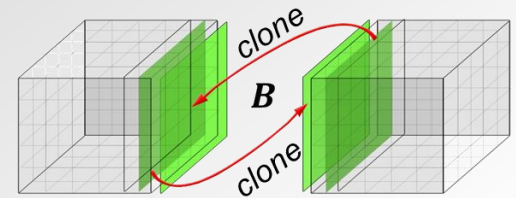
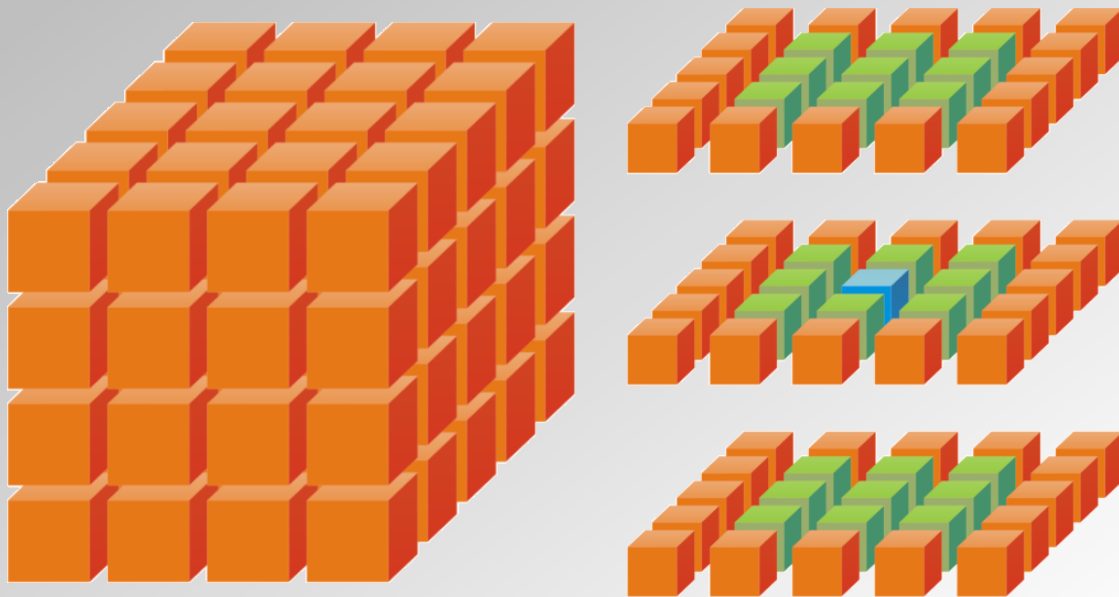
- Абстрагируются детали декомпозиции расчетной области, организации параллелизма и структур данных
- Разработчику достаточно написать код обработки одной частицы или сеточного значения
- Поддерживается кодами PICADOR и ELMIS
- Позволяет расширить возможности кода усилиями широкого круга исследователей

Интерфейс PIC-MDK

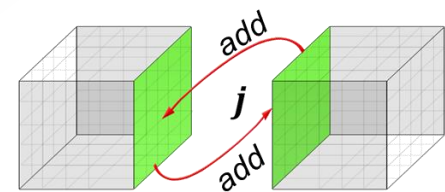


Параллелизм в PICADOR

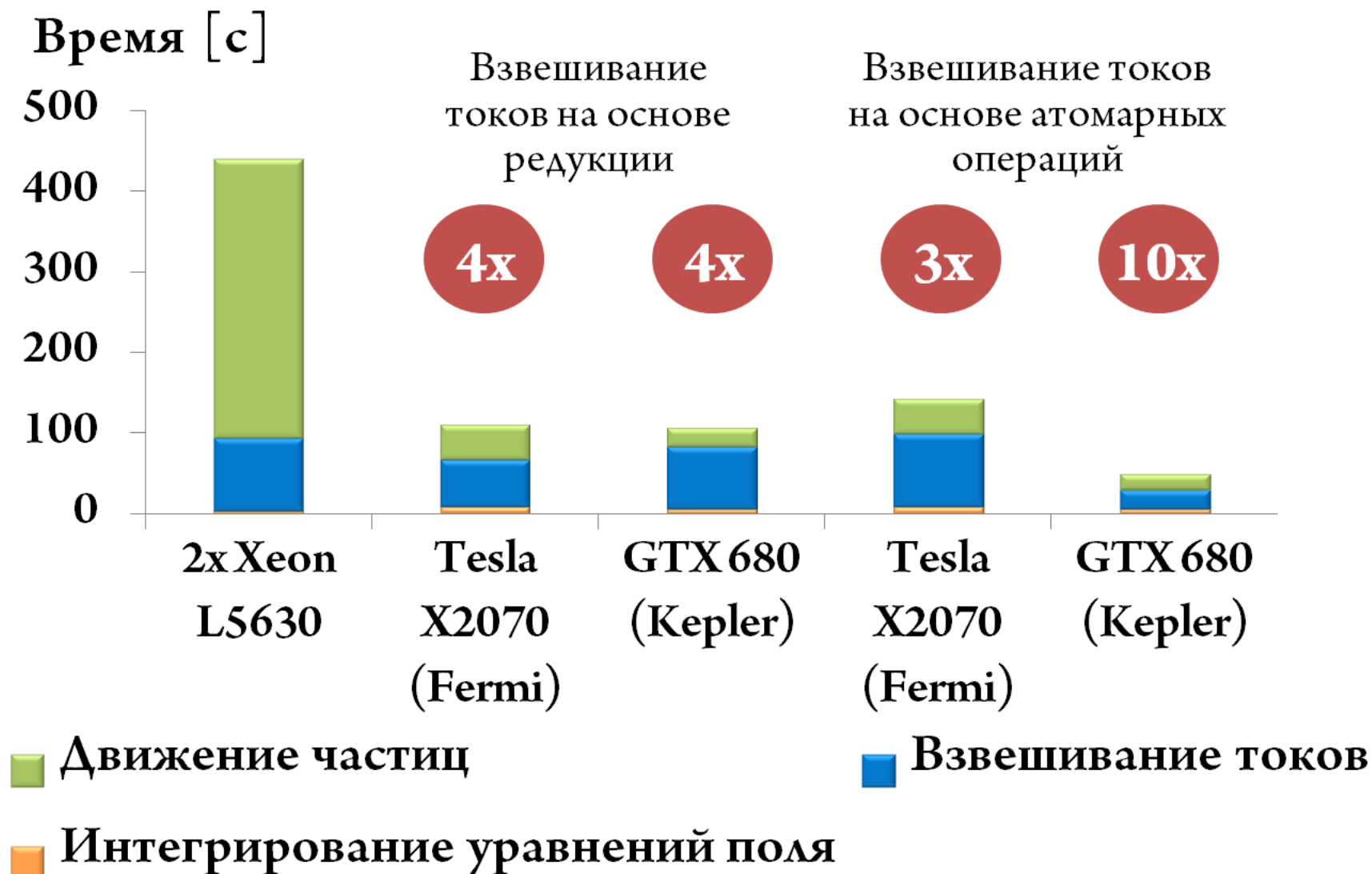
- 3D-декомпозиция по территориальному принципу
- Каждый процесс обменивается только с соседними



- Динамическая балансировка нагрузки
- Связка MPI + OpenMP/CUDA
- Поддержка CPU + GPU, CPU + XeonPhi

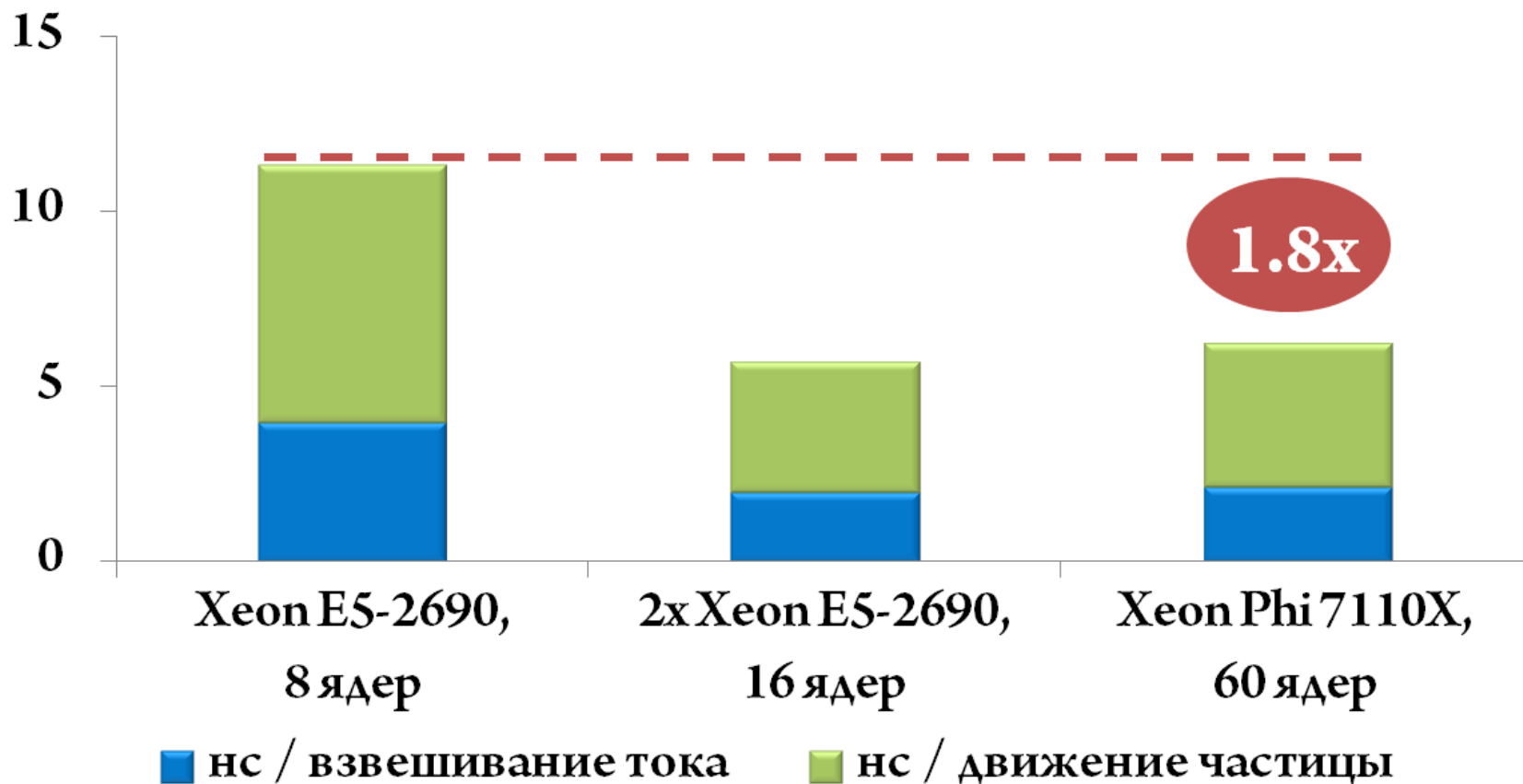


Производительность: CPU и GPU

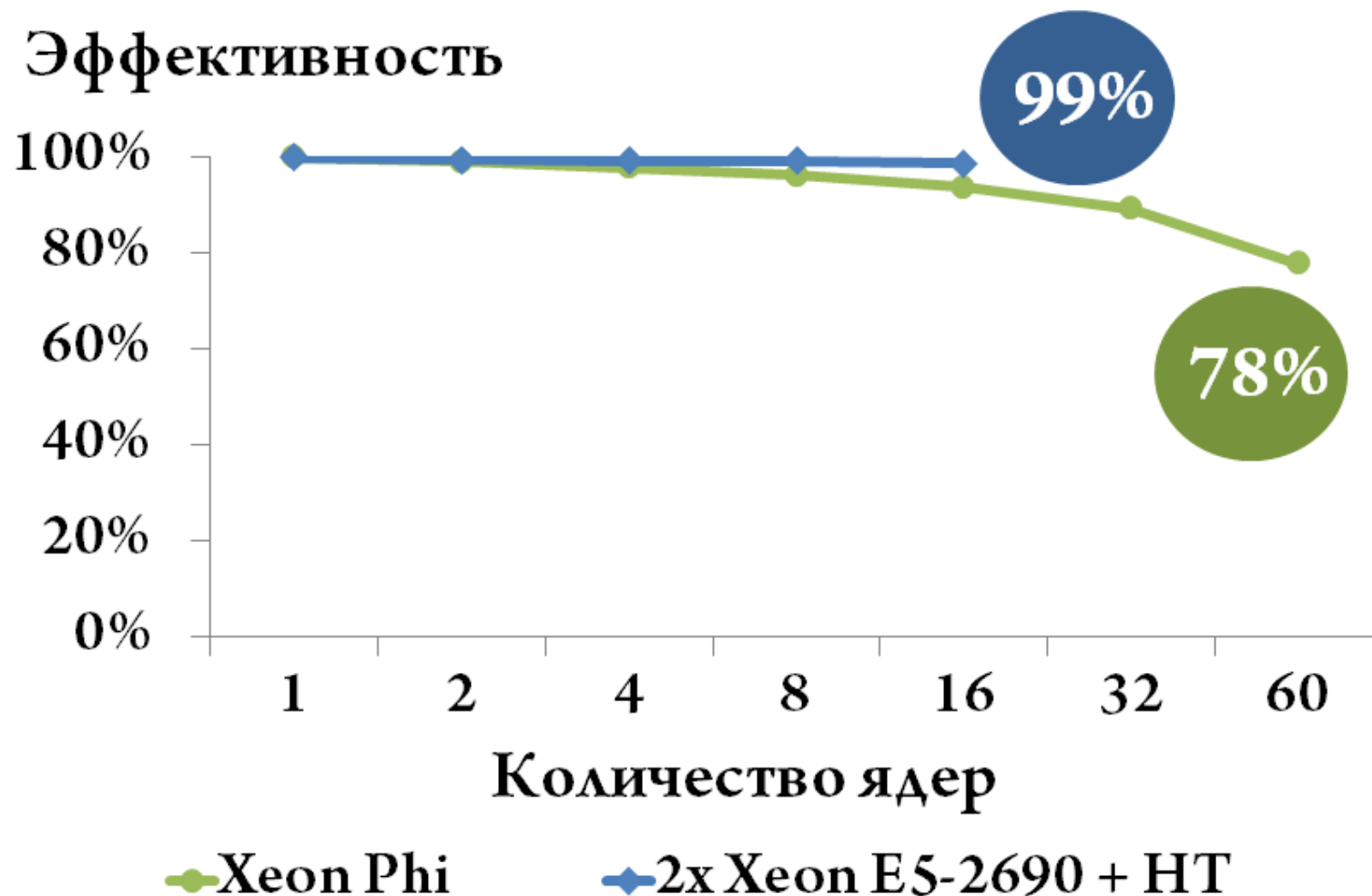


Производительность: CPU и Xeon Phi

[нс / обновление частицы]

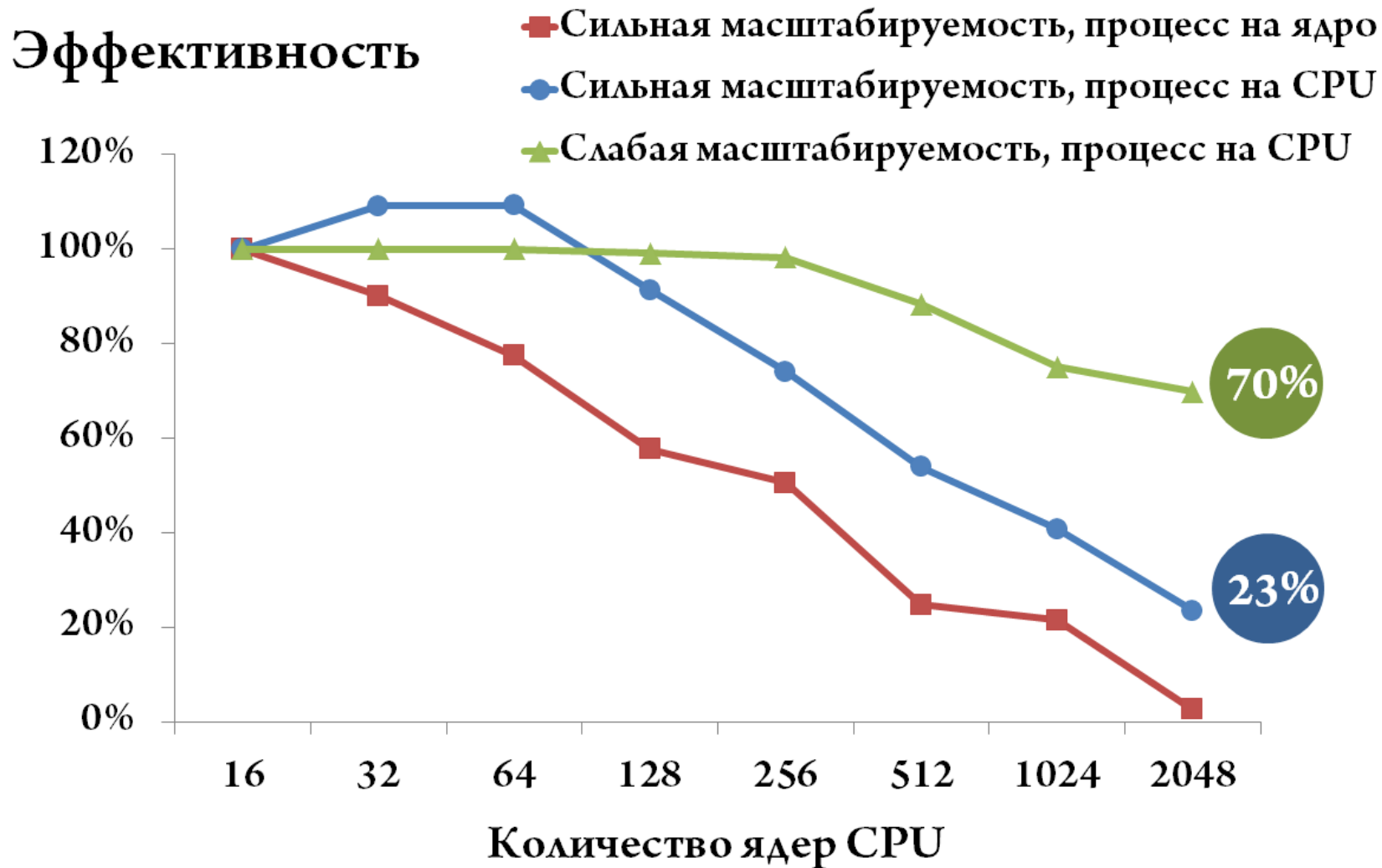


Масштабируемость на общей памяти



Идеальная масштабируемость на CPU

Масштабируемость на распределенной памяти



Вычислительные ресурсы

- МВС-100К, МВС-10П (МСПЦ РАН)
- Akka, Abisko, Triolith (HPCCenterNorth),
- «Лобачевский» (ННГУ)



Целевые приложения...

Фундаментальные явления сверхсильных полей

ИПФ РАН (2 постдока, 2 аспиранта) +

Chalmers Univ. of Tech. (1 постдок, 1 аспирант)

Последние публикации:

PRL **111**, 060404 (2013)

PRL **113**, 014801 (2014)

*явление и концепция эксперимента,
предложенная коллективом,
на обложке журнала PRL*



Целевые приложения

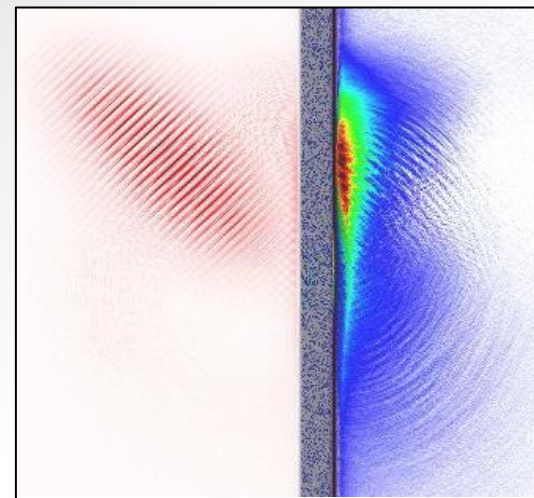
Компактные источники заряженных частиц

ИПФ РАН (1 постдок), публикация PRL **109**, 245008 (2012).

Шведский проект **PIONA**: экспериментальные и теоретические исследования в Chalmers Univ. Of Tech., Umeå Univ., Lund Univ. (~ 20 исследователей; 2014 - 2019).

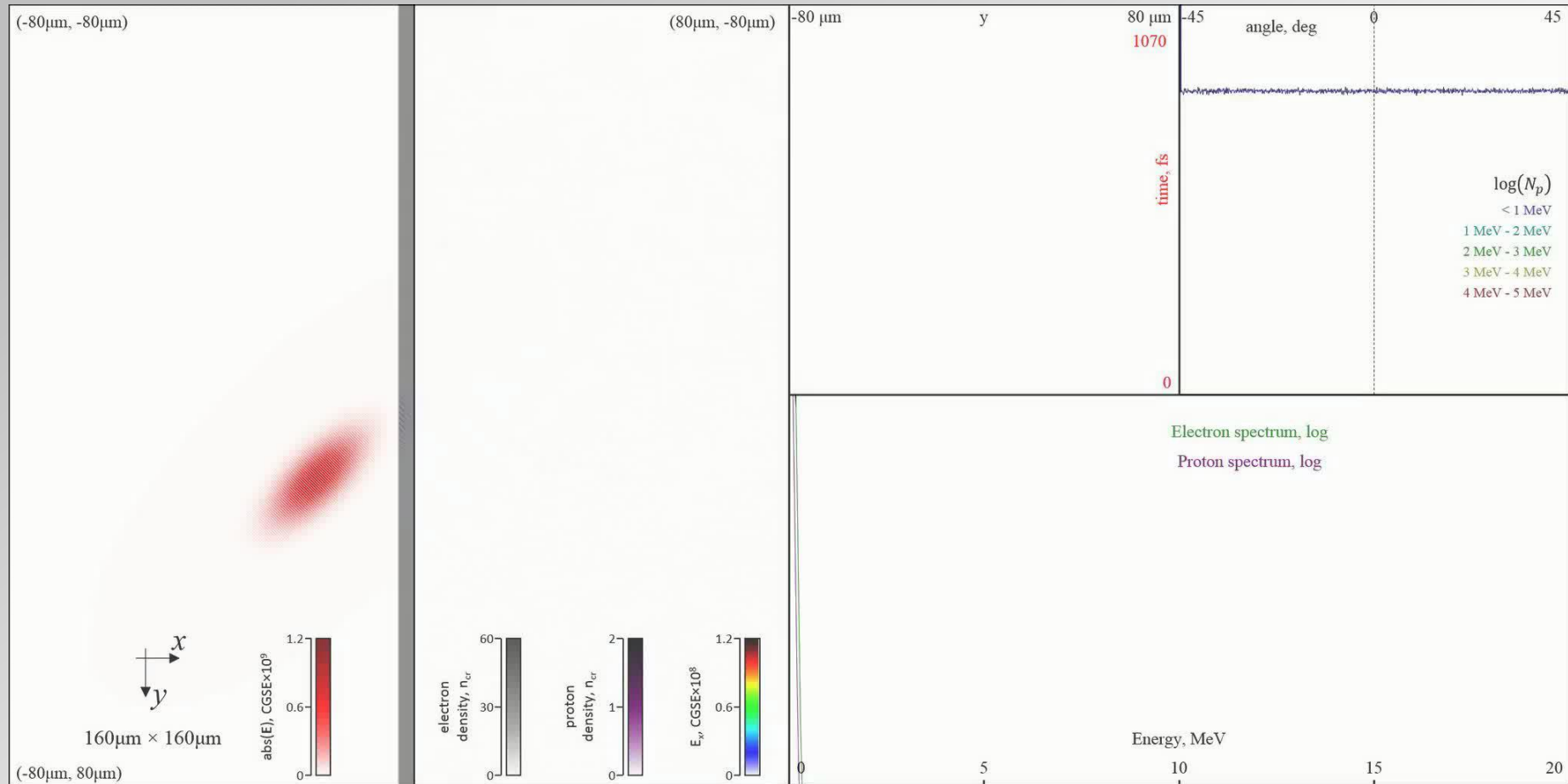


Беспрецедентная задача достижения
детального согласия моделирования
с экспериментом и для проектирования
новых мишеней.



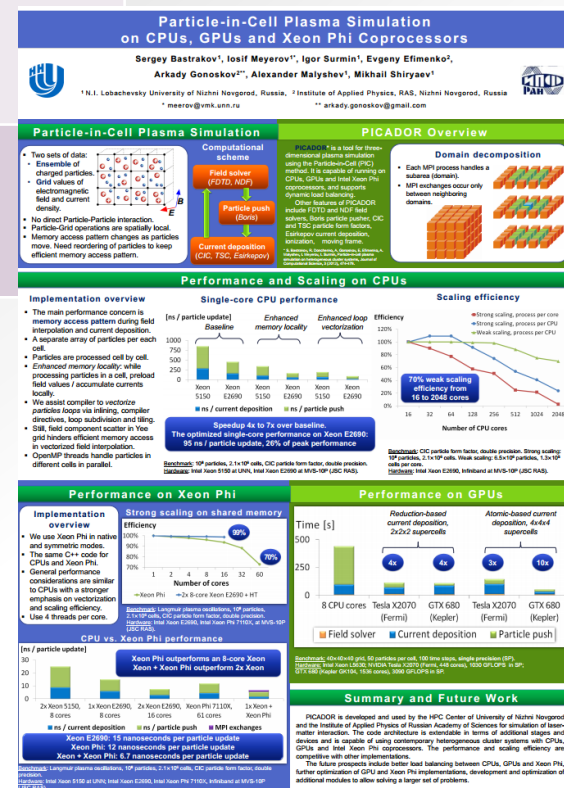
смоделированный процесс TNSA

Целевые приложения



Journal	IF Scopus (SJR)	IF Web of Science
Physical Review Letters	4.099	7.728
European Physical Journal: Special Topics	0.926	1.76
Lecture Notes in Computer Science	0.310	-

- 1 статья направлена, 3 готовятся
- Постер на центральной в Европе HPC-конференции International Supercomputing Conference (Leipzig, Germany)



Команда и международное сотрудничество



ННГУ (разработка кода, исследование, оптимизация):
И. Мееров (к.т.н.), С. Бастраков, И. Сурмин, А. Ларин,
М. Млодик, А. Розанов, М. Савичев

сообщество пользователей

Научная экспертиза, разработка компонент, эксплуатация:



ИПФ РАН: Е. Ефименко*, А. Коржиманов* (к.ф.-м.н.),
А. Башинов*, А. Муравьев*



Chalmers University of Technology: А. Гоносков* (к.ф.-м.н.,
PhD), С. Harvey (PhD), F. Mackenroth (PhD), J. Magnusson



Lund University (использование для поддержки экспериментов):
О. Lundh (PhD), В. Aurand (PhD)

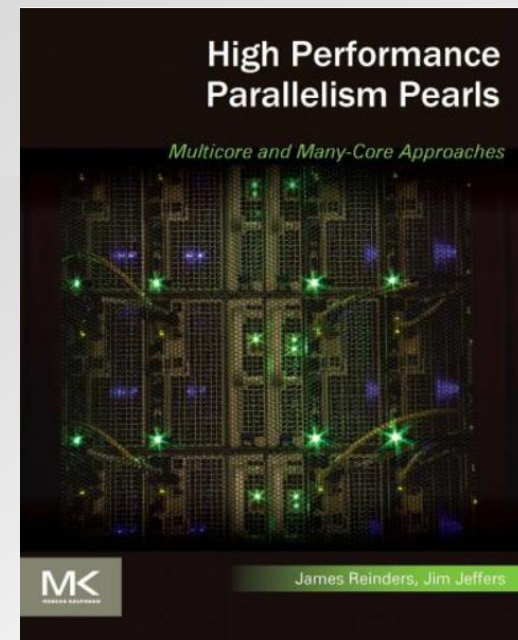


Umeå University (разработка компонент, эксплуатация):
Е. Wallin

* сотрудник ННГУ

Три ключевых достижения – 2014

- Один из первых PIC-кодов на Xeon Phi
 - Методика оптимизации
 - Побочный результат: глава в книге **High Performance Parallelism Pearls** (Intel, Elsevier). Другая тематика, аналогичная методика оптимизации
- Создание и внедрение многоуровневой инфраструктуры управления и развития кода
- Переход от локальной разработки к реальному применению
 - Для ряда сложных явлений получено согласие с теоретическими и экспериментальными результатами
 - Начато применение для ряда исследований



Планы на будущее

- **Программная часть:**
 - Улучшение масштабируемости на кластерных системах
 - Балансировка при использовании устройств разной архитектуры
 - Нерегулярные сетки
 - Новые модули
- **Сотрудничество:**
 - Расширение спектра разработчиков и решаемых задач
 - Взаимодействие с научными центрами

Спасибо за внимание!



Суперкомпьютер «Лобачевский»

meerov@vmk.unn.ru
arkady.gonoskov@gmail.com

