



# Проблемы распараллеливания метода частиц в ячейках

В.А.ВШИВКОВ, А.В.

СНЫТНИКОВ

**взаимодействия**

vsh,shytan@ssu.ssc.ru

Институт Вычислительной Математики и  
Материальной Физики СО РАН  
**электронного пучка с**

Новосибирск

# Содержание

- Проблемы эффективного распараллеливания для большого числа процессоров
- Моделирование динамики плазмы методом частиц в ячейках
- Проведение больших численных расчетов на суперЭВМ
- О реализации метода частиц на GPU

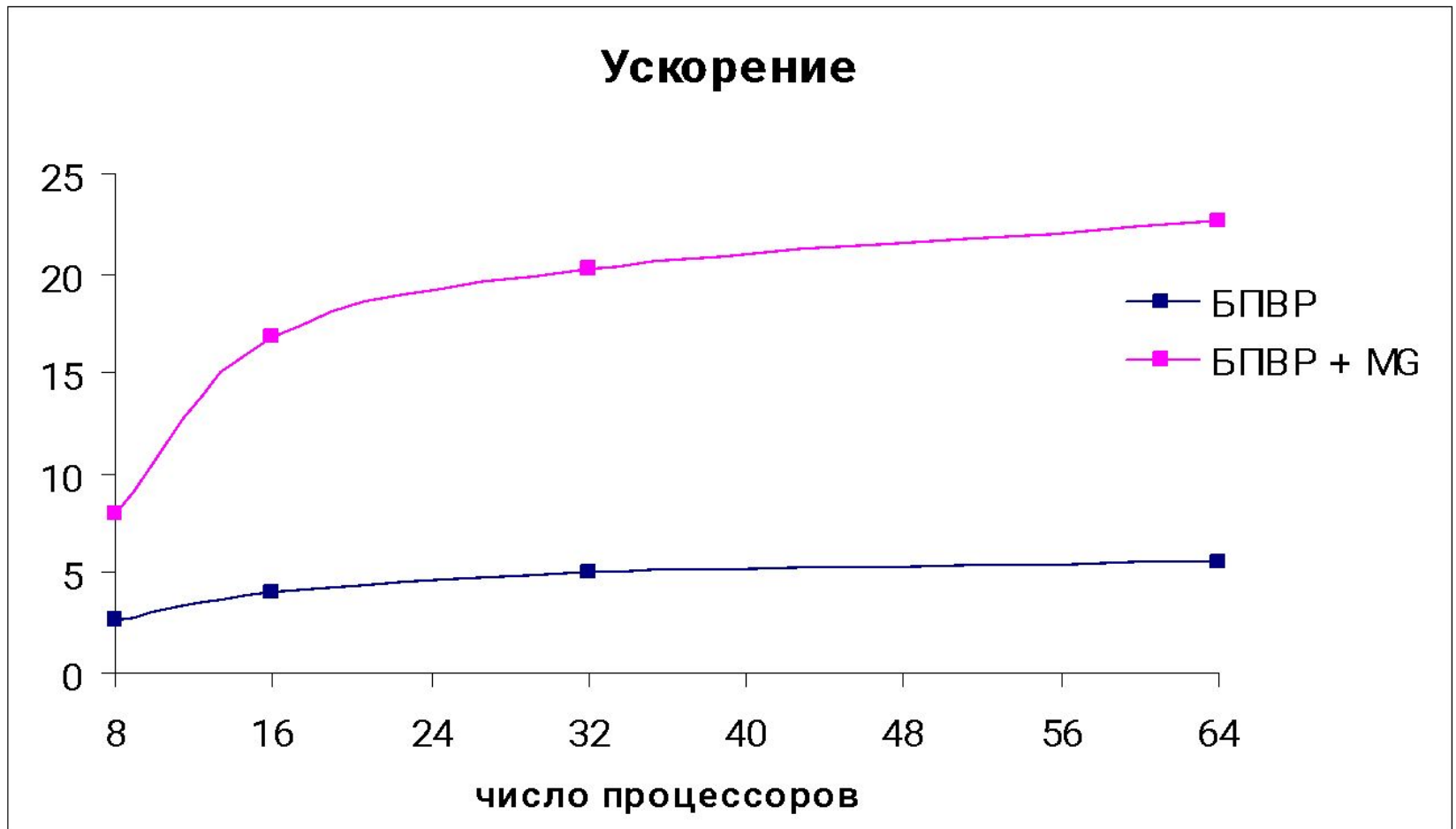
# Проблемы эффективного распараллеливания для большого числа процессоров

- Решение уравнения Пуассона
- Параллельная прогонка
- Метод частиц в ячейках

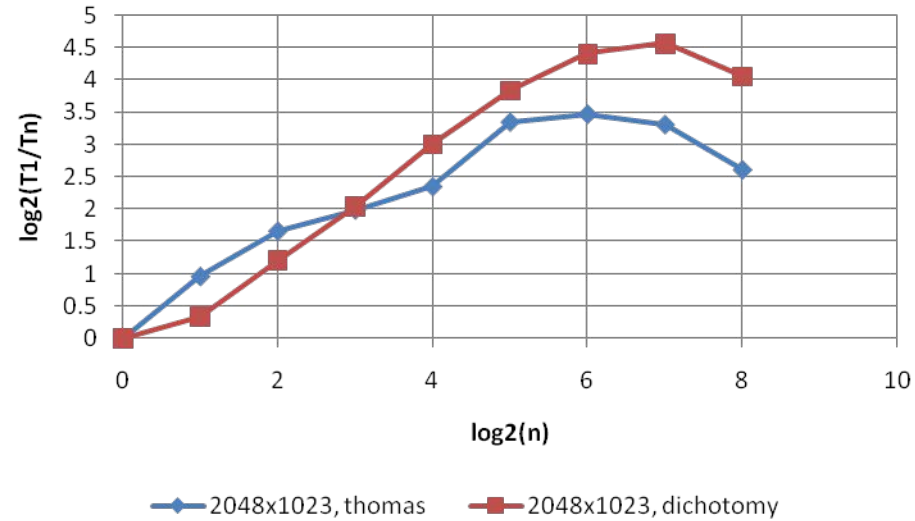
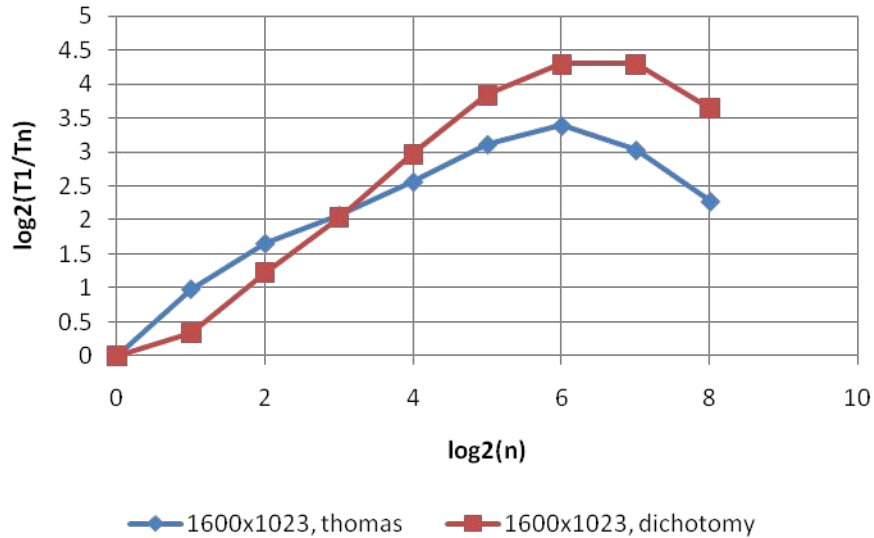
Rank	Site	Computer/Year Vendor	Cores	R <sub>max</sub>	R <sub>peak</sub>
1	<a href="#">RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS)</a> Japan	<a href="#">K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect</a> Fujitsu	548352	8162	8773.63
2	<a href="#">National Supercomputing Center in Tianjin</a> China	<a href="#">NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C</a> NUDT	186368	2566	4701
3	<a href="#">DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory</a> United States	<a href="#">Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz</a> Cray Inc.	224162	1759	2331
4	<a href="#">National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCS)</a> China	<a href="#">Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, NVidia Tesla C2050 GPU</a> Dawning	120640	1271	2984.3
5	<a href="#">GSIC Center, Tokyo Institute of Technology</a> Japan	<a href="#">HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows</a> NEC/HP	73278	1192	2287.63
6	<a href="#">DOE/NNSA/LANL/SNL</a> United States	<a href="#">Cray XE6 8-core 2.4 GHz</a> Cray Inc.	142272	1110	1365.81
7	<a href="#">NASA/Ames Research Center/NAS</a> United States	<a href="#">SGI Altix ICE 8200EX/8400EX, Xeon HT QC 3.0/Xeon 5570/5670 2.93 Ghz, Infiniband</a> SGI	111104	1088	1315.33
8	<a href="#">DOE/SC/LBNL/NERSC</a> United States	<a href="#">Cray XE6 12-core 2.1 GHz</a> Cray Inc.	153408	1054	1288.63
9	<a href="#">Commissariat a l'Energie Atomique (CEA)</a> France	<a href="#">Bull bullx super-node S6010/S6030</a> Bull SA	138368	1050	1254.55
10	<a href="#">DOE/NNSA/LANL</a> United States	<a href="#">BladeCenter QS22/LS21 Cluster, PowerXCell 8i 3.2 Ghz / Opteron DC 1.8 GHz, Voltaire Infiniband</a> IBM	122400	1042	1375.78

# Моделирование динамики протопланетного диска:

Ускорение при использовании различных методов решения уравнения Пуассона



# Зависимость логарифма ускорения от логарифма числа узлов



$T_n$  – Время работы на  $N$  узлах  
 $T_1$  – Время работы на 1 узле  
 $n$  – количество узлов

Толстых М.А., Терехов А.В., Поливанов Н.С. МФТИ

Реализация массивно-параллельной глобальной модели атмосферы  
нового поколения

Международная суперкомпьютерная конференция «Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее», Абрау-Дюрсо, 2011.

Всероссийская конференция  
**«Актуальные проблемы  
вычислительной математики и  
математического  
моделирования»**  
13 - 15 июня 2012 года  
Новосибирск, Россия

Тематика конференции:

*Математическое моделирование и  
Параллельные вычислительные  
методы*

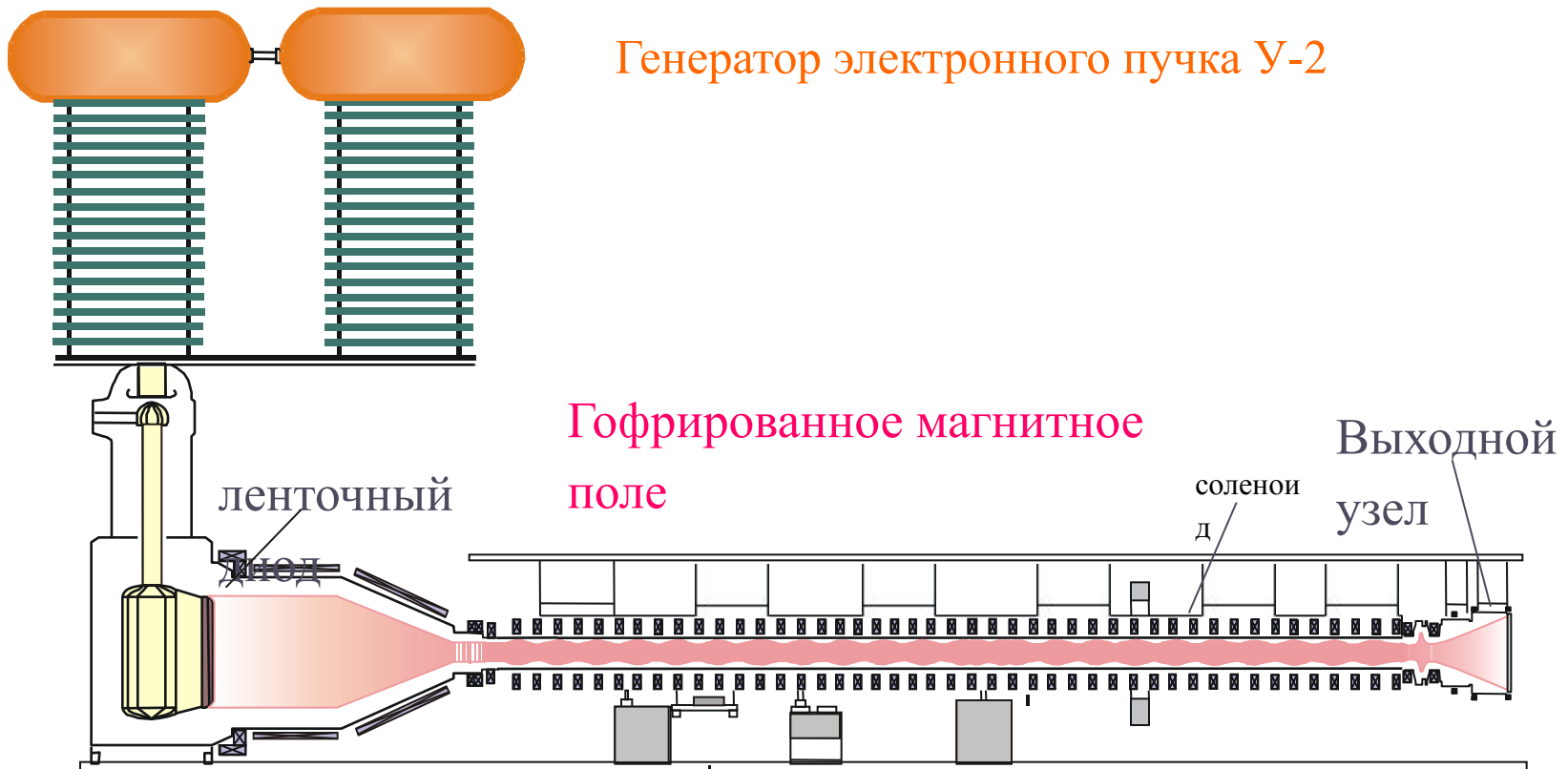
***Председатели программного комитета:***

академик Марчук Г.И.

академик Михайленко Б.Г.

# Установка ГОЛ-3 (ИЯФ СО РАН)

- Установка ГОЛ-3 представляет собой многопробочную термоядерную ловушку открытого типа с плазмой высокой плотности, нагреваемой мощным релятивистским электронным пучком. Плазма установки ГОЛ-3 по своим параметрам является субтермоядерной.





# Эффект аномальной теплопроводности

- В экспериментах на установке ГОЛ-3 (ИЯФ СО РАН) вследствие релаксации мощного электронного пучка наблюдается понижение электронной теплопроводности
- Коэффициент электронной теплопроводности уменьшается в  $10^2$ - $10^3$  раз по сравнению с классическим значением для плазмы с такой плотностью и температурой
- Это позволяет лучше нагревать плазму и дольше удерживать ее в нагретом состоянии вследствие намного меньшего теплового потока на стенки установки

# Система уравнений Власова-Максвелла

- Плазма описывается системой уравнений Власова-

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + (\mathbf{v}, \nabla) f_k + q_k \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{p}} = 0$$

$$\text{rot} \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

$$\text{div} \mathbf{E} = 4\pi \rho$$

$$\mathbf{j} = \sum_k q_k \int \mathbf{v} f_k(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{p}$$

$$\text{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}$$

$$\text{div} \mathbf{H} = 0$$

$$\rho = \sum_k q_k \int f_k(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{p}$$

где  $f_k$  - функция распределения частиц сорта  $k$  (электроны или ионы),  $c$  - скорость света,  $\rho$  - плотность электрического заряда,  $\mathbf{j}$  - плотность электрического тока,  $q_k$  - заряд частицы сорта  $k$ .

# Лагранжев этап

---

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + (\mathbf{v}, \nabla) f_k + q_k \left( E + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times H] \right) \frac{\partial f_k}{\partial p} = 0$$

$$\frac{dp_k}{dt} = q_k \left( E + \frac{1}{c} [\mathbf{v}_k, H] \right)$$

$$\frac{dr_k}{dt} = \mathbf{v}_k$$

$$\mathbf{p}_k = \gamma_k m_k \mathbf{v}_k, \quad \gamma_k = 1 / \sqrt{1 - v_k^2 / c^2}$$

---

# Эйлеров этап

- Эйлеров этап:

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = c \cdot \operatorname{rot} \vec{H} - 4\pi \vec{j}$$

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -c \cdot \operatorname{rot} \vec{E}$$

- Схема эйлерова этапа:

$$\frac{\vec{H}^{m+1/2} - \vec{H}^{m-1/2}}{\tau} = -c \cdot \operatorname{rot}_h \vec{E}^m,$$

$$\frac{\vec{E}^{m+1} - \vec{E}^m}{\tau} = c \cdot \operatorname{rot}_h \vec{H}^{m+1/2} - 4\pi \vec{j}^{m+1/2}.$$

# Восстановление плотности заряда по частицам

$$\rho_{i,l,k} = \sum_j q_j \bar{R}(r_j - r_{i,l,k})$$

$$\bar{R}(r_j - r_{i,l,k}) = R(x_j - x_i) \cdot R(y_j - y_l) \cdot R(z_j - z_k)$$

- NGP:

$$R(x) = \begin{cases} \frac{1}{h}, & |x| \leq \frac{h}{2} \\ 0, & |x| > \frac{h}{2} \end{cases}$$

- PIC:

$$R(x) = \begin{cases} \frac{1}{h} \left( 1 - \frac{|x|}{h} \right), & |x| \leq h \\ 0, & |x| > h \end{cases}$$

# Схема вычисления токов

$$jx_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = q \frac{\Delta x}{\tau} \left( (1-\delta_y)(1-\delta_z) + \frac{\Delta y \Delta z}{12h_y h_z} \right)$$

$$jx_{i,l-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = q \frac{\Delta x}{\tau} \left( (1-\delta_y)\delta_z - \frac{\Delta y \Delta z}{12h_y h_z} \right)$$

$$jx_{i,l+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = q \frac{\Delta x}{\tau} \left( \delta_y(1-\delta_z) - \frac{\Delta y \Delta z}{12h_y h_z} \right)$$

$$jx_{i,l+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = q \frac{\Delta x}{\tau} \left( \delta_y \delta_z + \frac{\Delta y \Delta z}{12h_y h_z} \right)$$

$$\delta_x = \frac{1}{h_x} \left( \frac{x_0 + x_1}{2} - x_i \right)$$

$$\delta_y = \frac{1}{h_y} \left( \frac{y_0 + y_1}{2} - y_l \right)$$

$$\delta_z = \frac{1}{h_z} \left( \frac{z_0 + z_1}{2} - z_k \right)$$

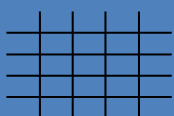
$$\Delta x = x_1 - x_0$$

$$\Delta y = y_1 - y_0$$

$$\Delta z = z_1 - z_0$$

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i-1/2,l-1/2,k-1/2}^{m+1} - \rho_{i-1/2,l-1/2,k-1/2}^m}{\tau} &\equiv \frac{j_{x,i,l-1/2,k-1/2}^{m+1/2} - j_{x,i-1,l-1/2,k-1/2}^{m+1/2}}{h_x} + \\ &+ \frac{j_{y,i-1/2,l,k-1/2}^{m+1/2} - j_{y,i-1/2,l-1,k-1/2}^{m+1/2}}{h_y} + \frac{j_{z,i-1/2,l-1/2,k}^{m+1/2} - j_{z,i-1/2,l-1/2,k-1}^{m+1/2}}{h_z} \end{aligned}$$


# Алгоритм метода частиц-в-ячейках



Вычисление сеточных величин в узлах фиксированной сетки  
по частицам

Решение уравнений на фиксированной сетке  
(Эйлеров этап)

Интерполяция сил из узлов сетки  
в местоположение частиц



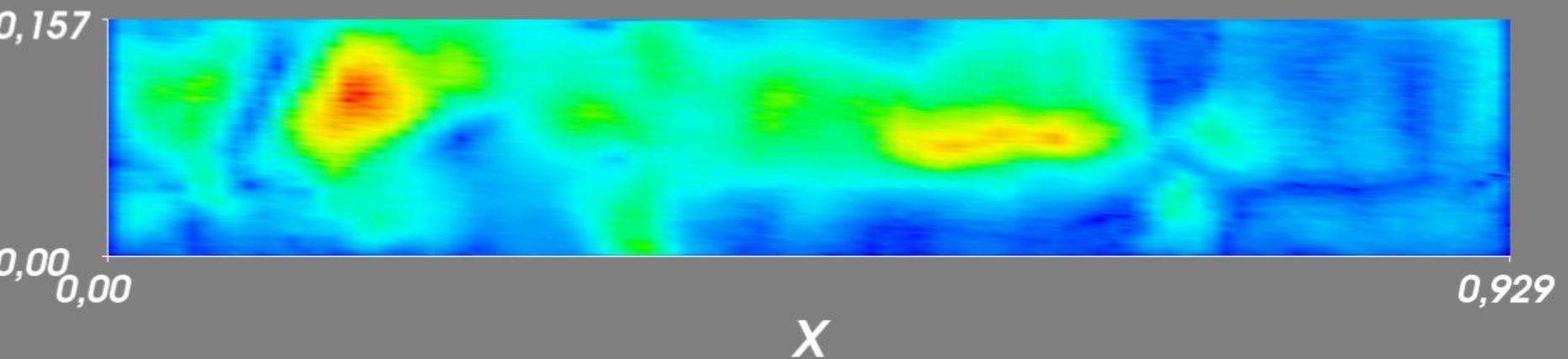
Движение частиц под действием сил  
(Лагранжев этап)

# Модуль потока тепловой энергии

электронов

$$|q| = |v_e| T_e$$

В соответствии с начальным предположением видно образование изолированных друг от друга областей с большим значением теплового потока



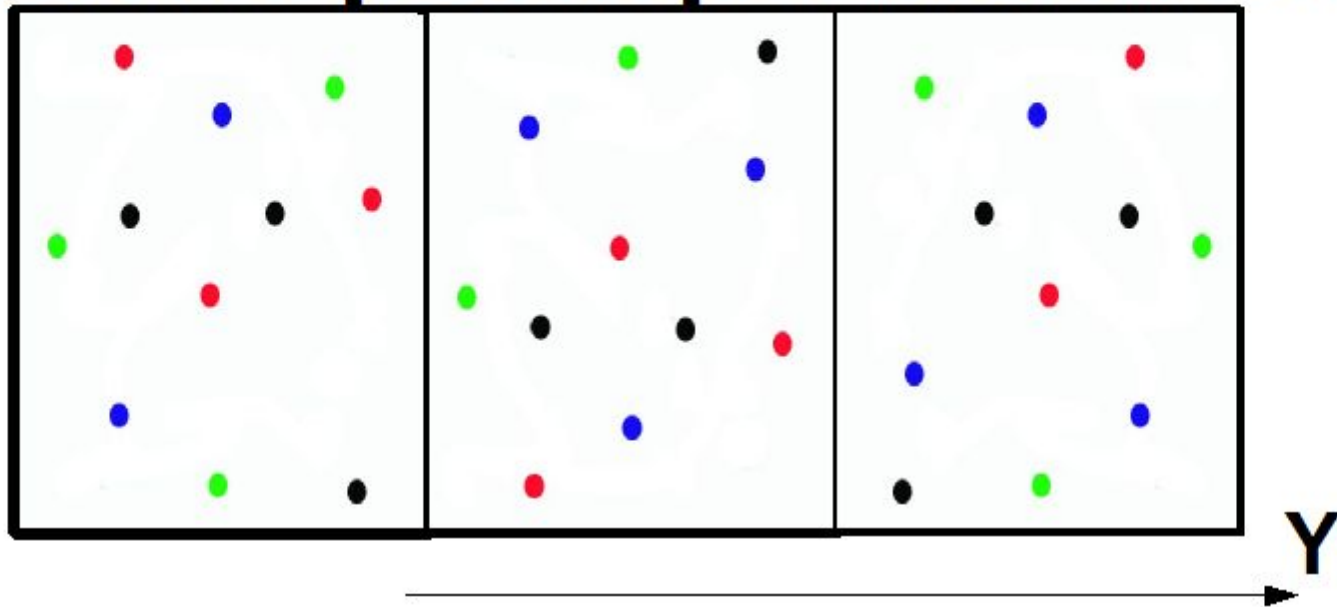
*Heat flow module*

0,000356    0,141    0,282    0,423    0,564    0,704    0,845    0,986





# Схема распараллеливания



- $N_{MAX} =$
- $M = 3$

- Расчетная область делится на  $N_{MAX}$  подобластей вдоль координаты  $Y$  для решения уравнений Максвелла
- для каждой подобласти назначается группа из  $M$  процессорных элементов
- Далее частицы каждой подобласти разделяются дополнительно между  $M$  процессорными элементами

# Проведение больших численных расчетов на суперЭВМ

- Оценка производительности суперЭВМ
- Повышение размерности задачи
- Компьютер — это не только процессоры
- Требования к системам хранения и передачи данных

# Оценка производительности суперЭВМ

- Принятая единица — FLOpS (теоретические, или реально достигнутые, напр. LINPACK )
- Однако для реальных задач большее значение имеет быстродействие (и объем) оперативной памяти,
- а также жесткого диска

Время работы процедуры интегрирования на 1 шаге:

СКИФ-МГУ – 0.422 сек

МВС-100К – 0.896 сек

# Значение объема жесткого диска

## Пример конкретной задачи

- Релаксация мощного релятивистского пучка в высокотемпературной плазме, метод частиц-в-ячейках, сетка 512x64x64, 150 частиц в ячейке
- Изучается трехмерная динамика теплопроводности и фурье-образы основных величин (плотности, электрического поля — на данный момент 4 величины)
- Одна выдача занимает 160 Мб (архив 20)
- Необходимо от 100 до 400 моментов
- Требуется выдать все это на диск за ограниченное время работы программы — (один файл, СКИФ МГУ vs MBS-100K: 0.0134 сек. vs 0.0364 сек.)
- И не превысить дисковую квоту — возможно, это в большей степени вопрос администрирования — **но он существует**
- А потом еще передать по сети на локальный компьютер для обработки — по этой причине трехмерные выдачи делались пока только на НКС-30Т (ИВМиМГ СО РАН)

# Повышение размерности

## задачи

- Существуют планы по поводу вычислений Exascale-масштабе.
- Тем не менее, лишь небольшое количество программ сейчас используют 1000 ядер (или больше), т.е. терафлопные мощности.
- Опыт проведения крупномасштабных расчетов свидетельствует, что при увеличении размерности на порядок появляются принципиально новые трудности в реализации алгоритма.
- Поэтому категорически нельзя сразу переходить от мелких, отладочных задач к крупномасштабным.
- А речь идет о повышении размерности на 6 порядков...

# Компьютер — это не только процессоры

- Результат расчета в задачах физики плазмы (не только в рассмотренной выше) - это прежде всего, **трехмерные распределения плотности частиц, токов, распределения электромагнитного поля (сетка  $2000^3$ )**.
- Для сравнения численного результата с известными физическими закономерностями необходимо вычислить **фурье-образ рассматриваемой величины**
- Если они выдаются в двоичном формате, то размер одной такой выдачи составит 60 Гб. Но это один момент времени, в то время как требуется от 100 до 300 моментов времени с выдачей в течение одного расчета, то есть около **18 Петабайт**
- Более того, для решения какого-то отдельного вопроса в рамках задачи необходимо несколько (5-10) расчетов, то есть всего получается около **200**

# Требования к системам хранения и передачи данных

- Объем диска - 200 Петабайт.
- Скорость диска - 270 Гбайт/сек (для обработки указанного массива данных в течение часа). Сейчас для SSD-дисков скорость чтения порядка 0.7 Гб/сек.
- Скорость сетевого соединения - 11 Гб/сек (для передачи этого массива данных по сети в течение суток), при том, что сейчас время передачи 1 Гб данных по внутренней сети ННЦ СО РАН занимает около получаса, т.е. 0.0005 Гб/сек.
- Видно, что **недостаток мощности систем хранения** и передачи данных между текущим состоянием и перспективными экзафлопс-компьютерами **ненамного меньше, чем по вычислительным мощностям** (при том, что системам хранения данных традиционно уделяется меньше внимания).

# О реализации метода частиц на GPU

- Необходимость
- Методика
- Результаты



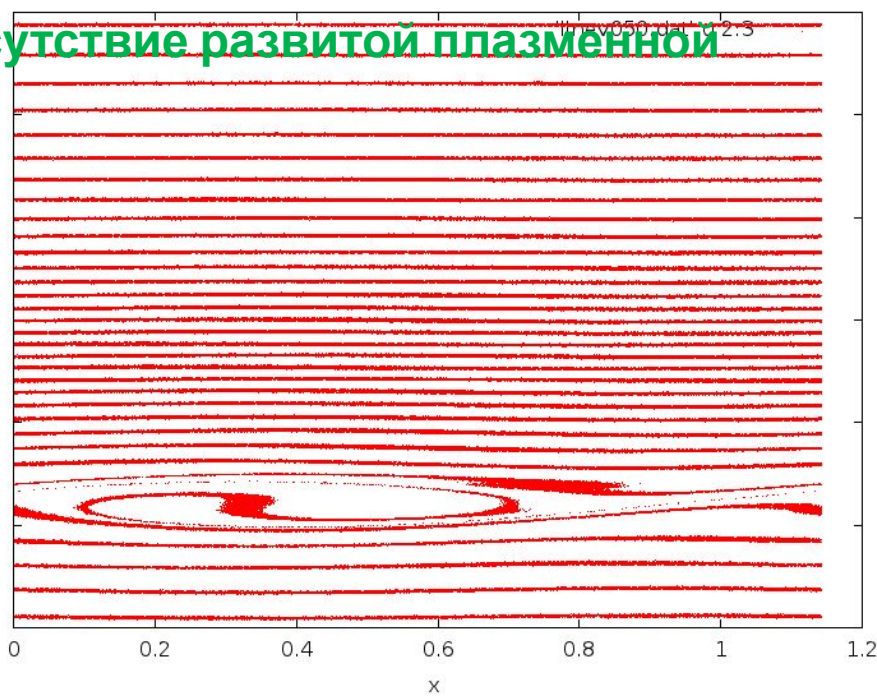
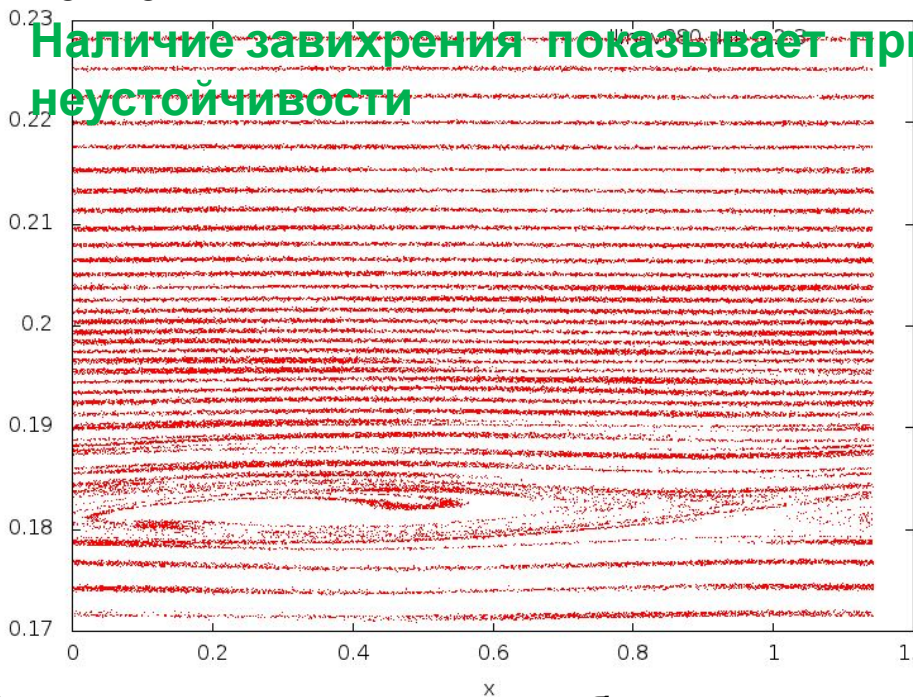
# О необходимости использования большого числа частиц

На фазовых плоскостях показана скорость частиц пучка в зависимости от координаты

Частица смещается в том случае, когда она взаимодействует с плазменной волной

Число частиц в ячейке = 1000

Число частиц в ячейке = 4000



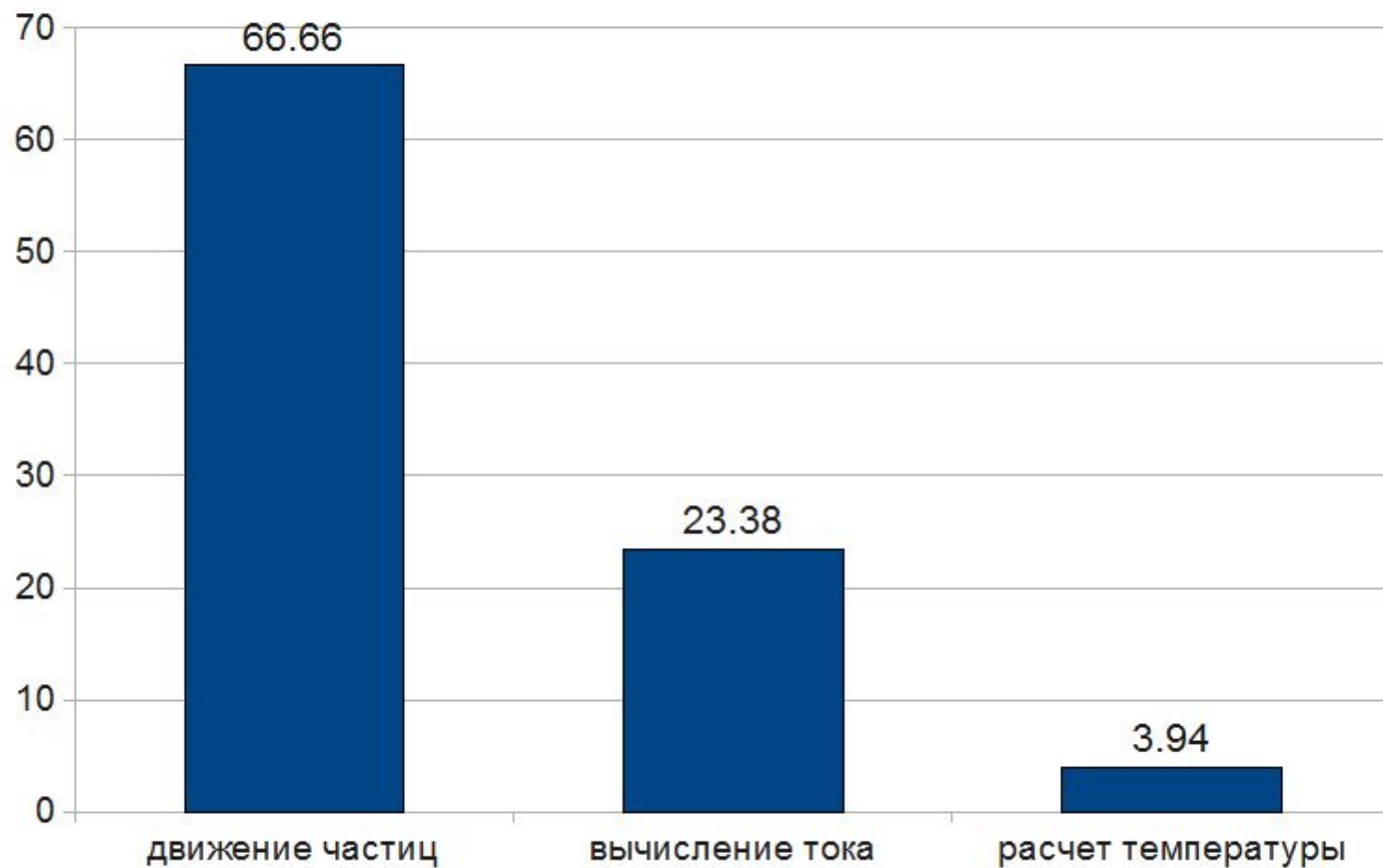
На рисунках видно, что при большом количестве частиц процесс развития неустойчивости лучше соответствует теоретическим представлениям

Принципиально то, что в процессе образования неустойчивости (по физике) участвует лишь

# Оценка размера задачи

- В настоящее время проведены расчеты взаимодействия релятивистского электронного пучка с плазмой, позволившие в квазиодномерном случае точно рассчитать инкремент двухпоточковой неустойчивости
- Получено  $g = 0.081$ , точное значение  $g = 0.077$  (К.В.Лотов и др., Физика плазмы, 2009).
- Однако для этого пришлось значительно увеличить число модельных частиц  $n$  а именно до 1000 в одной ячейке.
- При этом величина дебаевского радиуса  $8.9 \times 10^{-3}$  в тех же единицах.
- Таким образом длина области в дебаевских радиусах составляет 134.8.
- Таким образом, получаем следующую оценку размера сетки: **2156x2156x2156 при 1000 модельных частиц каждого типа в ячейке.**
- **Это означает объем памяти 1.4 Петабайт и вычислительную нагрузку порядка 1.5 PetaFLOP (около 50 операций на каждую частицу)**

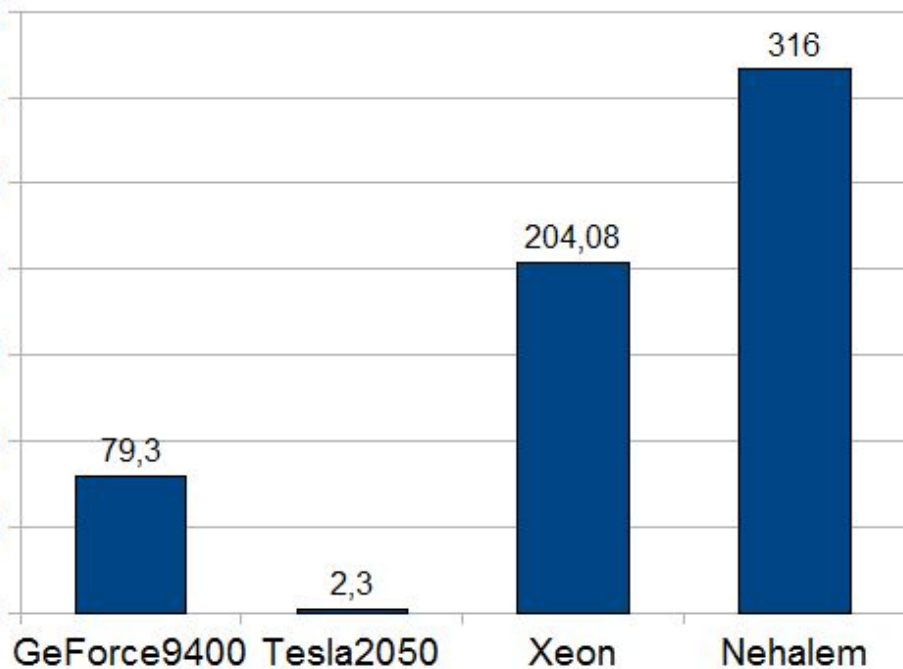
# Распределение времени работы (в СКИФ-МГУ)



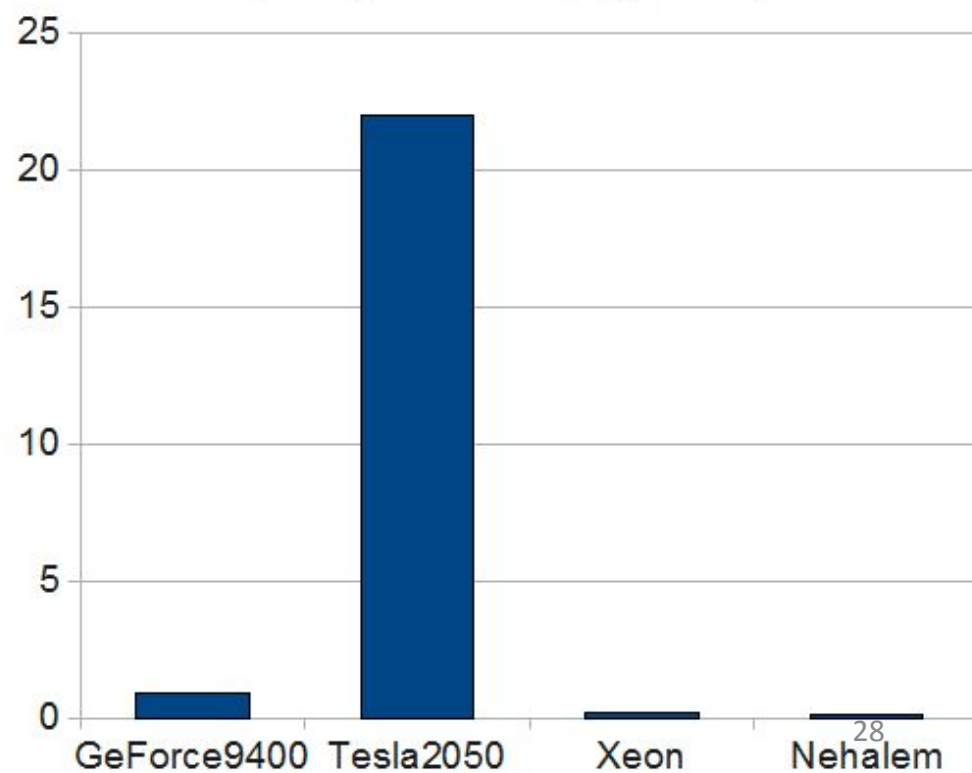
Разница между движением частиц и вычислением тока в отсутствии обращений к большим одномерным массивам

# Сравнение производительности CPU vs GPU

Время счета (1 млн. частиц)



Производительность (GygaFLOPS)



# Использование текстур CUDA

- Что такое текстура: способ доступа к памяти
- Двух- или трехмерный массив с кэшированием, оптимизированным для двумерной адресации
- Двумерные координаты текстуры означают:
  - Номер ячейки,  $i$
  - Номер частицы в ячейке,  $j$
- Атрибуты частицы хранятся в 6 разных текстурах

# Перспективы достижения экзафлопс-производительности для метода частиц-в-ячейках на GPU

- Используемая в настоящий момент одномерная декомпозиция области не может обеспечить достаточную масштабируемость
- Время счета одного временного шага составило 0.3 миллисекунды для одного миллиона частиц с двойной точностью (ГрафИТ!, НИВЦ МГУ).
- Так как для каждой частицы выполняется приблизительно 250 операций, то производительность одной карты Tesla может быть оценена как **833 ГигаФлопс (0.8 Терафлопс)**

# О перспективах достижения экзафлопс-производительности. Если...

- Взять за основу для рассуждений Tianhe-1A,
- Выделить для каждой подобласти один ускоритель Tesla и один универсальный процессор,
- Считать, что необходимое количество частиц помещается в оперативную память узла,
- Предположить, что время обмена данными между подобластями не превысит имеющегося сейчас,
- В таком случае компьютер Tianhe-1A дал бы для метода частиц в ячейках производительность порядка **5.6 PetaFLOPS**.
- Такая же производительность могла бы быть достигнута при использовании порядка 250 тыс. 4-ядерных процессоров Xeon.

# Заключение

1) В настоящее время параллельные методы и алгоритмы недостаточно разработаны, в связи с чем невозможно эффективно использовать существующие вычислительные мощности.

2) Для успешного создания эффективных параллельных алгоритмов и программ необходимо учитывать:

а) специфику задачи и метода;

б) архитектуру вычислительного комплекса.



ЦЕНТР КОЛЛЕКТИВНОГО  
ПОЛЬЗОВАНИЯ ССКЦ ПРИ ИВМиМГ СО РАН



Научный руководитель: академик Б.Г. Михайленко

Исполнительный директор: д.т.н. Б.М. Глинский

Зам. исполнительного директора: д.т.н. В.Э. Малышкин

Ученый секретарь: к.ф.-м.н. И.Г. Черных

В состав ЦКП ССКЦ входят следующие лаборатории  
ИВМиМГ:

Лаб. Сибирский суперкомпьютерный центр

Лаб. Синтеза параллельных программ

Лаб. Вычислительной физики

Лаб. Параллельных алгоритмов решения больших задач

# ОСНОВНЫЕ ЗАДАЧИ ЦКП ССКЦ



- Обеспечение работ институтов СО РАН и университетов Сибири по математическому моделированию в фундаментальных и прикладных исследованиях.
- Координация работ по развитию суперкомпьютерных центров Сибири, осуществляемая Советом по супервычислениям при Президиуме СО РАН.
- Организация обучения специалистов СО РАН и студентов университетов (ММФ и ФИТ НГУ, НГТУ) методам параллельных вычислений на суперкомпьютерах (поддержка ежегодных зимних и летних школ по параллельному программированию для студентов).
- Сотрудничество с INTEL, HP и промышленными организациями, тестирование новых процессоров.
- Сетевое взаимодействие с другими Суперкомпьютерными центрами СО РАН, Москвы и других городов России, а также зарубежных стран, совместная разработка технологий распределенных вычислений.

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ РЕСУРСЫ ЦКП ССКЦ



## Кластер НКС-160

(hp rx1620)

168 процессор.  
Itanium 2,  
1,6 ГГц;  
InfiniBand,  
Gigabit  
Ethernet (GE);  
> 1 ТФлопс



## Кластер НКС-30Т

(hp BL2X220c)

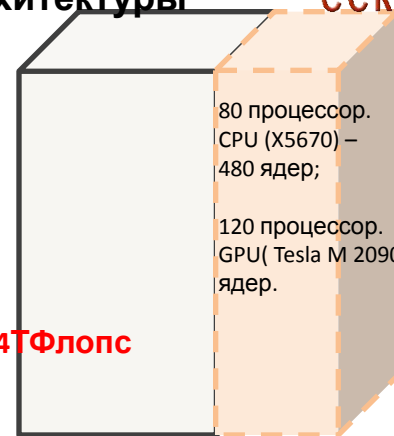
Общее число  
процессоров  
Intel Xeon  
E5450/E5540/X5670  
576 (2688 ядер);  
InfiniBand, GE;  
**30 ТФлопс**



## Кластер гибридной архитектуры

80 процессор.  
CPU (X5670) –  
480 ядер;  
120 процессор.  
GPU (Tesla M 2090) - 6144  
ядер.

**85,4 ТФлопс**



## СИСТЕМЫ ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ (СХД)

Параллельная файловая  
система IBRIX  
для НКС-30Т  
32 Тбайт



СХД  
для НКС-30Т  
36 Тбайт  
(max-120 Тбайт)



СХД  
для НКС-160  
3,2 Тбайт



СХД сервера с общей памятью  
9 Тбайт (max-48 Тбайт)



GigabitEthernet  
InfiniBand



## Сервер с общей памятью

(hp DL580 G5)

4 процессора  
(16 ядер)  
Intel Xeon Quad  
Core X7350,  
2,93 ГГц;  
**256 Гбайт**  
общая память;  
**187,5 ГФлопс**



## ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Системное  
Общематематическое  
Прикладное (ППП)

GE  
GE



**Спасибо за внимание!**

# Переход к безразмерным переменным

- скорость света  $c = 3 \times 10^{10}$  см/с
- плотность плазмы  $n_0 = 10^{14}$  см<sup>-3</sup>
- плазменная электронная частота  
 $\omega_p = 1.6 \times 10^6$  сек<sup>-1</sup>

# ГРАНТЫ, ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ КОТОРЫХ ИСПОЛЬЗОВАЛИСЬ УСЛУГИ ЦКП ССКЦ В 2010 Г.



Всего грантов, программ  
и проектов — **120**

Из них Российских — **119**,  
Международных — **1**.

Грантов РФФИ — **41**

Программ РАН — **24**

Проектов СО РАН — **20**

Программ Минобрнауки —  
**9**

Другие — **26**

---

Всего публикаций — **142**

Российских — **86**

Зарубежных — **56**

Гранты по институтам:

ИВМиМГ — **30**

ИВТ — **2**

ИК — **11**

ИКЗ (Тюмень) — **2**

ИМ — **1**

ИНГиГ — **4**

ИНХ — **8**

ИТ — **9**

ИТПМ — **16**

ИФП — **1**

ИХБФМ — **1**

ИХиХТ (Красноярск) — **3**

ИХКиГ — **8**

ИЦиГ — **11**

ИЯФ — **4**

НГТУ — **3**

НГУ — **3**

Унипро — **3**

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И  
ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ БОЛЬШИХ ЗАДАЧ  
СО РАН И ИХ РЕАЛИЗАЦИЯ НА МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ  
СУПЕРЭВМ (МИП №26 СО РАН)  
(Координатор, академик Б.Г. Михайленко)



- Проект объединяет 12 Институтов СО РАН: ИВМиМГ; ИНГГ; ИВТ; ИК; ИТПМ; ИЦиГ; ИВМ; ИФП; ИМ; ИХБиФМ; ИСЭ; ОФИМ.
- Основная цель проекта: эффективное решение больших задач СО РАН из разных научных областей на многопроцессорных суперЭВМ.
- Получены первые обобщающие результаты, как в распараллеливании алгоритмов, так и в параллельной реализации 3D моделей для различных областей науки.
- Основным инструментом при реализации проекта являются вычислительные средства ЦКП ССКЦ при ИВМиМГ СО РАН.