Эффективное использование многоядерных сопроцессоров при суперкомпьютерном статистическом моделировании электронных лавин

М.А. Марченко

ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск

Абрау-Дюрсо, 27 сентября 2013 г.

Коллектив

Результаты получены в рамках выполнения междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН №126 **"Импульсные разряды в газах высокого давления и моделирование газоразрядных, плазмохимических и газодинамических процессов методом Монте-Карло".**

Координаторы проекта по институтам:

- член-корр. Г.А. Михайлов, д.ф.-м.н. С.В. Рогазинский (ИВМиМГ СО РАН);
- д.ф.-м.н. Ю.Д. Королев (ИСЭ СО РАН)

Участники проекта по институтам:

- д.ф.-м.н. С.А. Ухинов, к.ф.-м.н. Г.З. Лотова, к.ф.-м.н. М.А. Марченко (ИВМиМГ СО РАН)
- д.ф.-м.н. В.В. Рыжов, В.А. Шкляев (ИСЭ СО РАН)

Аннотация

- Разработан параллельный **трехмерный** алгоритм статистического моделирования электронных лавин.

  Алгоритм учитывает ускорение электронов в электрическом поле, процессы упругого рассеяния электронов на молекулах газа и ионизации, а также возбуждения. Для этого используются соответствующие сечения 24-х типов взаимодействий для азота.

- Алгоритм реализован в программе **ELSHOW (Electron SHOWer).**

- Программа ELSHOW апробирована на кластере НКС-30Т с MPP архитектурой (ИВМиМГ СО РАН) и на кластере МВС-10П с сопроцессорами Intel Xeon Phi (МСЦ РАН).

План доклада

- Постановка задачи
- Описание алгоритма
- Результаты расчетов
- Параллельная реализация

Постановка задачи

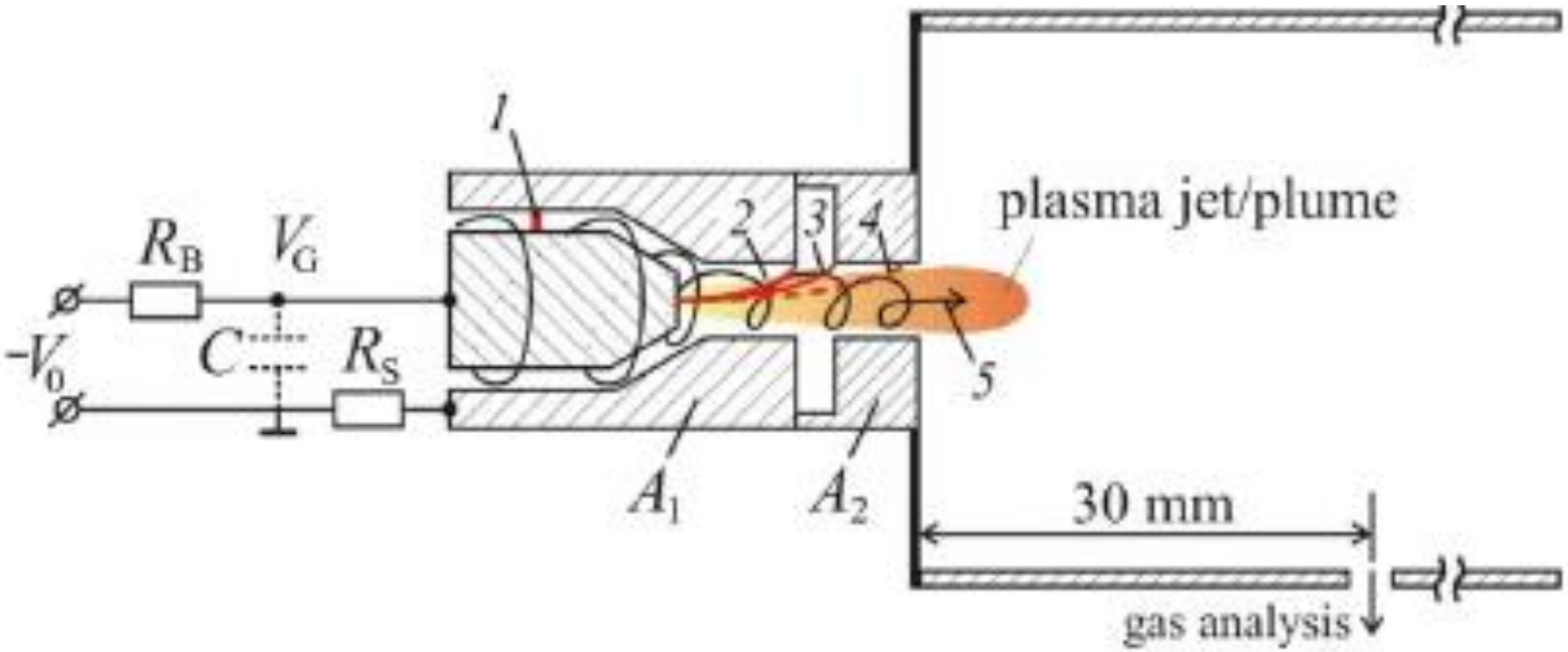
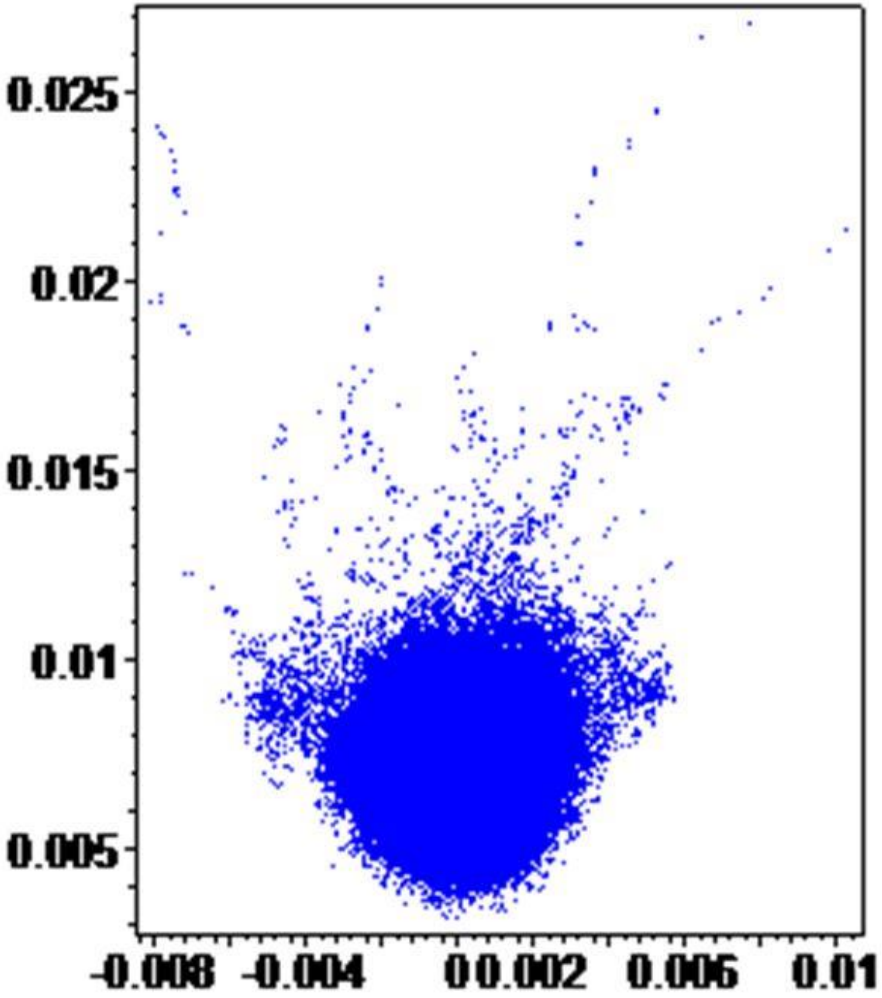


Схема плазматрона с камерой для взятия проб выходящего газа и электрической схемой питания разряда.

Постановка задачи



Типичный вид ионного остова лавины (результат моделирования)

Постановка задачи

Цели численного моделирования:

- описание предпробойной стадии в лавине (т.е. до момента, когда собственное электрическое поле электронов и ионов лавины становится сравнимым с внешним электрическим полем).
- получение в заданные моменты времени числа частиц в лавине $\boldsymbol{n}$, положения центра масс лавины $\mathbf{r}_c = (\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle z \rangle)$, средней скорости частиц $\langle V_z \rangle$, средней энергии частиц $\langle \varepsilon \rangle$, гистограммы плотности частиц, а также их среднеквадратические погрешности.
- сравнение результатов численного моделирования с известными экспериментальными и расчетными данными.

Постановка задачи

На основе результатов моделирования вычисляются различные характеристики лавины (**функционалы**):

- скорость центра масс $V_c = \langle z \rangle / t_{max}$
- скорость дрейфа $V_{dr} = \langle V_z \rangle$.
- коэффициенты поперечной D_T и продольной диффузии D_L находятся путем определения по гистограмме соответствующих диффузионных радиусов
- коэффициент ударной ионизации α – по формуле:

$$\alpha = (V_c - (V_c^2 - 4\,\beta_i)^{1/2}) / (2\,D_L),$$

где $\beta_i = \ln(n/n_0) / t_{max}$ - частота ионизации.

Описание алгоритма

По методу Монте-Карло моделируются независимые реализации электронной лавины

$$\xi_1 , \xi_2,\ldots, \xi_N$$

Каждая реализация ξ_i состоит из большого числа электронов.

Для каждой реализации лавины вычисляются значения заданной функции

$$\varphi_i = f(\xi_i),\ i=1,2,\ldots,N$$

Полученные реализации $\{\varphi_i\}$ осредняются и по закону больших чисел получается оценка нужного функционала (т.е. некоторой характеристики лавины):

$$\varphi = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \varphi_i$$

Описание алгоритма

- Для численного статистического моделирования реализаций лавины используется **метод индивидуальных соударений.**

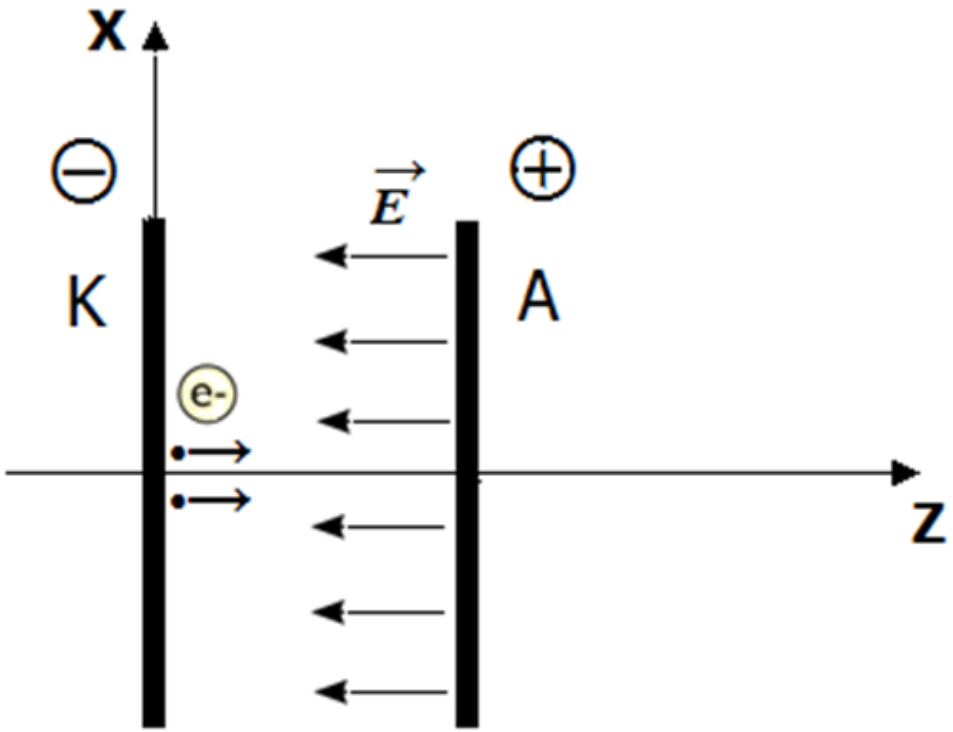
  В основе модели – ветвящийся марковский случайный процесс.

  Моделируется траектория каждого электрона.

- Отличительно особенностью такого подхода, по сравнению с другими методами (например, методом расчета функции распределения, численного решения уравнений переноса или метода «утолщенных» траекторий или укрупненных соударений) является **возможность изучения динамики процесса развития лавины во времени и влияния на нее незначительных флуктуаций.**

Описание алгоритма

В неподвижном газе рассматривается система анод-катод с внешним электрическим полем, напряженность которого $E = (0, 0, -E_z)$ считается постоянной.



Описание алгоритма

- С катода из точки $r = (x, y, z) = (0, 0, 0)$ в момент времени $t = 0$ происходит выброс n_0 электронов с нулевыми энергиями.
- Прослеживаются траектории движения каждого из первичных электронов, а также всех вторичных электронов, образовавшихся в результате ионизации, до достижения времени t_{max}.
- Делаются одинаковые шаги Δt по времени. За время Δt электрон с энергией T_{i-1} движется из точки r_{i-1} до точки r_i, где i – номер шага. При этом координаты и скорости изменяются следующим образом:

$$r_i = r_{i-1} + v_{i-1}\,\Delta t - e\,E\,|v_{i-1}|^2\,\Delta t^2/(4\,T_{i-1}),$$

$$v_i = v_{i-1} - e\,E\,|v_{i-1}|^2\,\Delta t/(2\,T_{i-1}).$$

Описание алгоритма

В конце каждого шага разыгрывается столкновение электрона с атомами газа с вероятностью

$$P = 1 - \exp(- б_t (T_i) N \Delta l),$$

где $б_t$ – полное микроскопическое сечение взаимодействий, N – концентрация частиц газа.

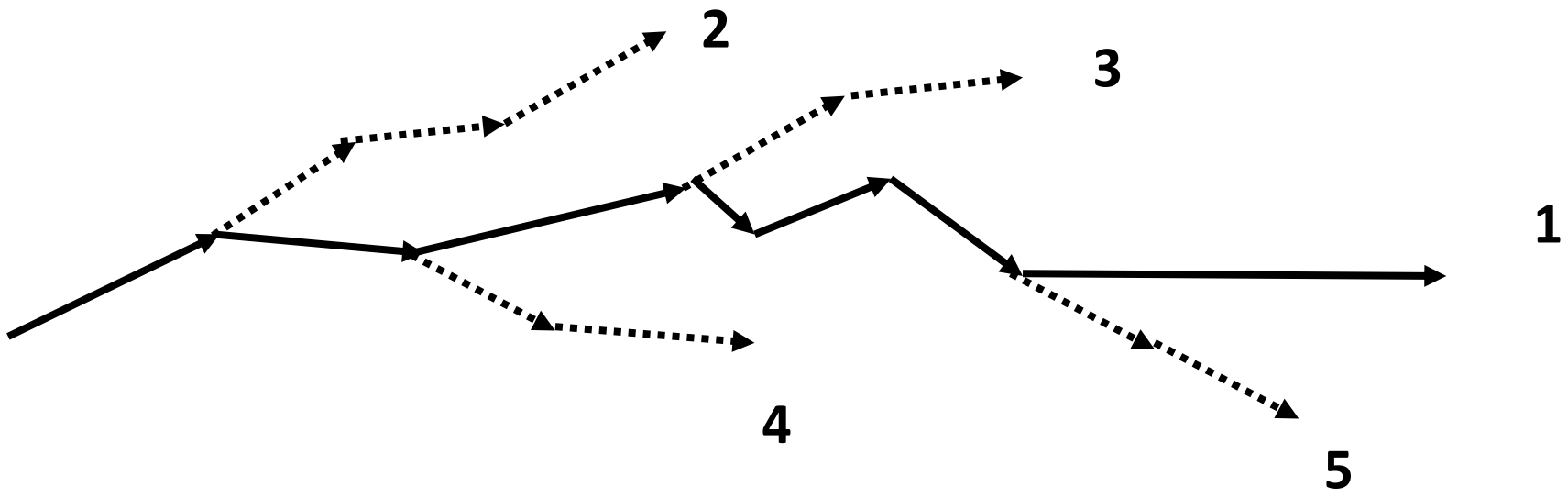
При столкновении разыгрывается тип взаимодействия электрона с атомом в соответствие с заданными таблицами сечений:

- упругое рассеяние налетающего электрона на атоме газа,
- один из видов возбуждения атома электроном,
- ионизация атома с образованием вторичного электрона

Описание алгоритма

Лексикографическая схема

- При моделировании развития лавины в массив частиц («магазин») фактически записываются лишь вторичные частицы, которые образовались в результате ионизации.
- Затем моделируется путь одной из вторичных частиц до достижения времени t_{max}, и так далее до тех пор, пока все вторичные частицы не будут рассмотрены.



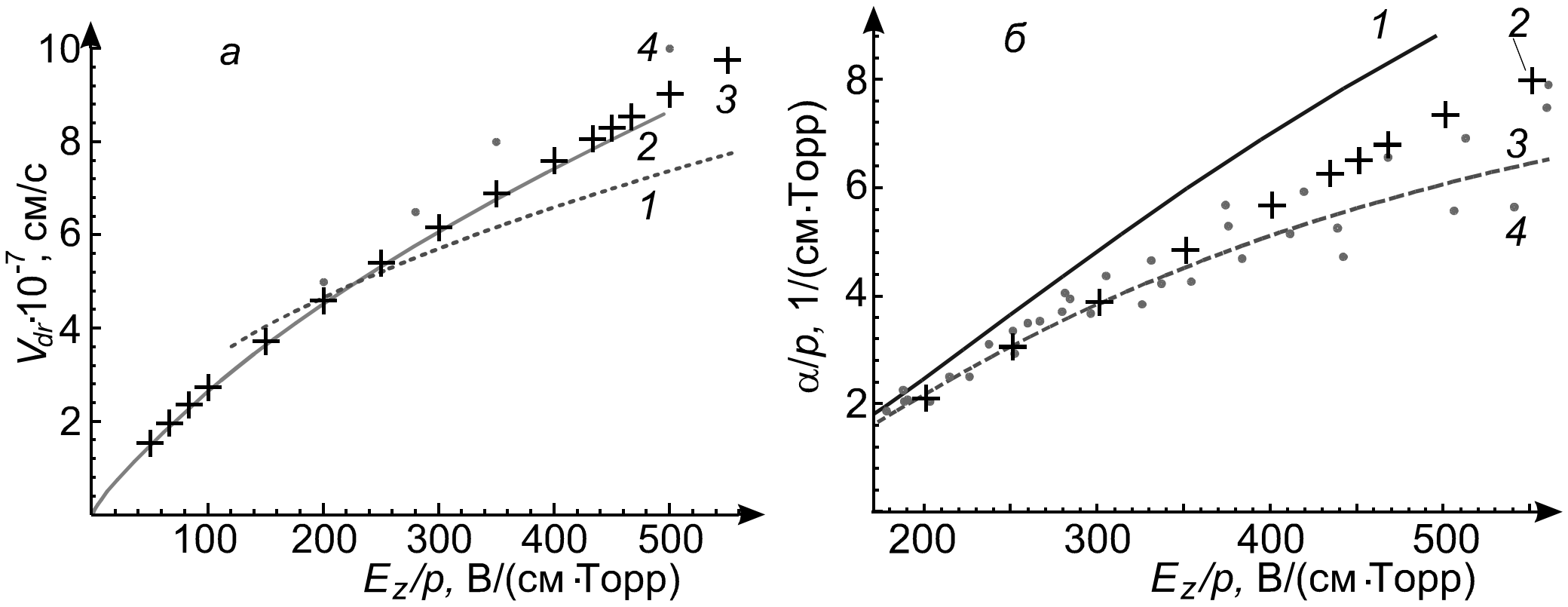
Результаты расчетов

- Данная вычислительная модель хорошо согласуется с теоретическими и экспериментальными данными при

$$E_z/p < 200 \text{ В/(см}\cdot\text{Торр)}$$

- В проведенных расчетах с использованием ELSHOW относительная погрешность оценки характеристик лавины - около 3 %.

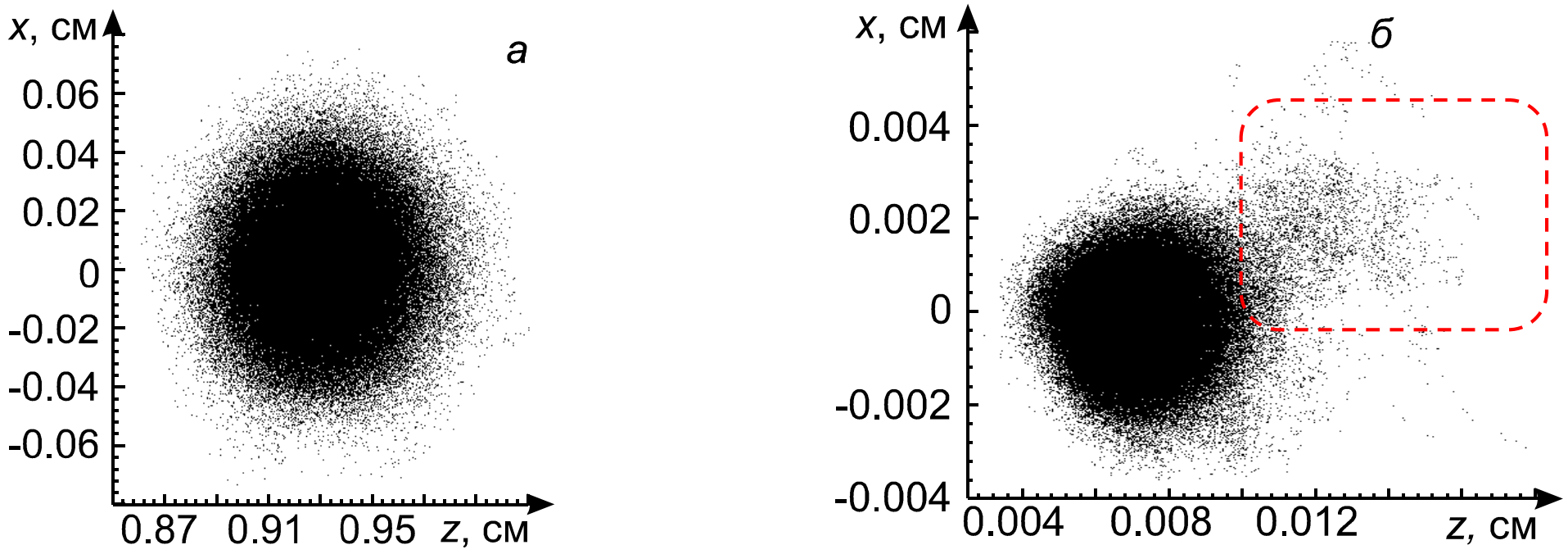
Результаты расчетов



Зависимость скорости дрейфа (*а*) и приведенного коэффициента ударной ионизации (*б*) от E_z / p; «крестики» - ELSHOW, сплошные кривые – BOLSIG+, точки – данные экспериментов

Результаты расчетов

С помощью метода Монте-Карло можно учитывать маловероятные события.



Электронные лавины в азоте при
E_z/p = 50 В/(см·Торр), t = 90 нс **(*а*)** и E_z/p = 500 В/(см·Торр), t = 0.055 нс **(*б*)**

Параллельная реализация

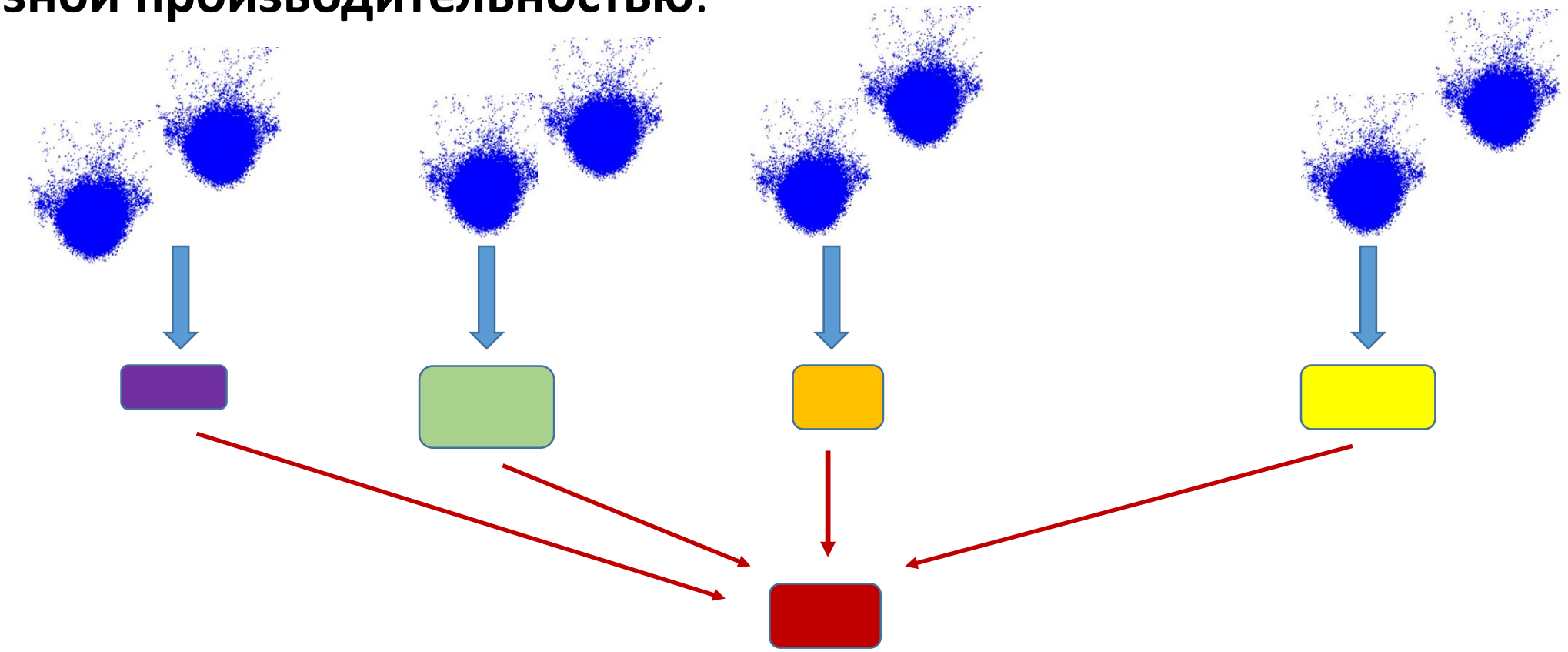
Большая трудоемкость алгоритма обусловлена:

- большим временем моделирования каждой реализации вследствие:
  - большого числа шагов по времени
  - большого числа частиц в лавине (до 10^8 – 10^9 частиц).

    Число частиц в лавине растет экспоненциально со временем.
- большой дисперсией оценок функционалов
- большими потребностями в оперативной и дисковой памяти для хранения рабочих массивов (до нескольких Гб на каждую траекторию).

Параллельная реализация

Крупнозернистое распараллеливание состоит в перенаправлении моделирования независимых реализаций лавины на разные вычислительные ядра, причем **допустимо использовать ядра с разной производительностью**.



Параллельная реализация

Параллельный генератор случайных чисел

- Следует определять различные подпоследовательности базовых псевдослучайных чисел для моделирования соответствующих реализаций лавины электронов.
- Такой способ можно назвать **распределительным**, так как он особенно удобен для распределенных вычислений.
- В частности, распределительный способ **коррелирует статистические оценки** для различных вариантов задачи, улучшая параметрический анализ результатов.
- Предлагаемый распределительный способ использовался, например, для выбора шага по времени.

Параллельная реализация

Базовый 128-битный линейный конгруэнтный генератор

$$u_0 = 1, u_n \equiv u_{n-1} A (\bmod 2^{128}), \alpha_n = u_n 2^{-128}, \mathrm{n} = 1,2,\ldots$$

$$A \equiv 5^{100109} (\bmod 2^{128})$$

Параллельный генератор (формулы для начальных значений в параллельных подпоследовательностях):

$$u_{(m+1)\mu} = u_{m\mu} A_\mu (\bmod 2^{128}), \alpha_{m\mu} = u_{m\mu} 2^{-128}, \mathrm{m} = 0,1,\ldots$$

$$A_\mu \equiv A^\mu (\bmod 2^{128})$$

Параллельная реализация

- С целью практической реализации распределенного статистического моделирования на кластере НКС-30Т ЦКП ССКЦ СО РАН с MPP архитектурой применялась программная библиотека **PARMONC**[1].
- PARMONC позволяет быстро распараллелить «последовательное» статистическое моделирование **для практически неограниченного числа ядер**; распределение вычислительной нагрузки по процессорным ядрам, сбор результатов и контроль статистической погрешности делается автоматически.

[1] Марченко М.А. Страница библиотеки PARMONC на сайте ЦКП ССКЦ СО РАН:

http://www2.sscc.ru/SORAN-INTEL/paper/2011/parmonc.htm

Параллельная реализация

Особенности счета на кластере с MPP архитектурой

- **В случае большого числа частиц** в лавине ядра сохраняют «избыточные» частицы на диск для дальнейшей обработки.
- На каждом узле можно запускать MPI-процессов меньше, чем число ядер. В таком случае ядра одного узла могут обмениваться «избыточными» частицами через общую память, а при необходимости сохранять их на диск для дальнейшей обработки.

Но в таком случае падает эффективность – возможность получить заданное число реализаций за заданное время.

Параллельная реализация

Расчеты на кластере НКС-30Т:

- Использовалось до нескольких сотен вычислительных ядер.
- На каждом ядре для моделирования реализаций было доступно до 8 Гб оперативной памяти.

Только использование таких массивно-параллельных вычислений позволило нам получить оценки базовых функционалов с приемлемой погрешностью.

Параллельная реализация

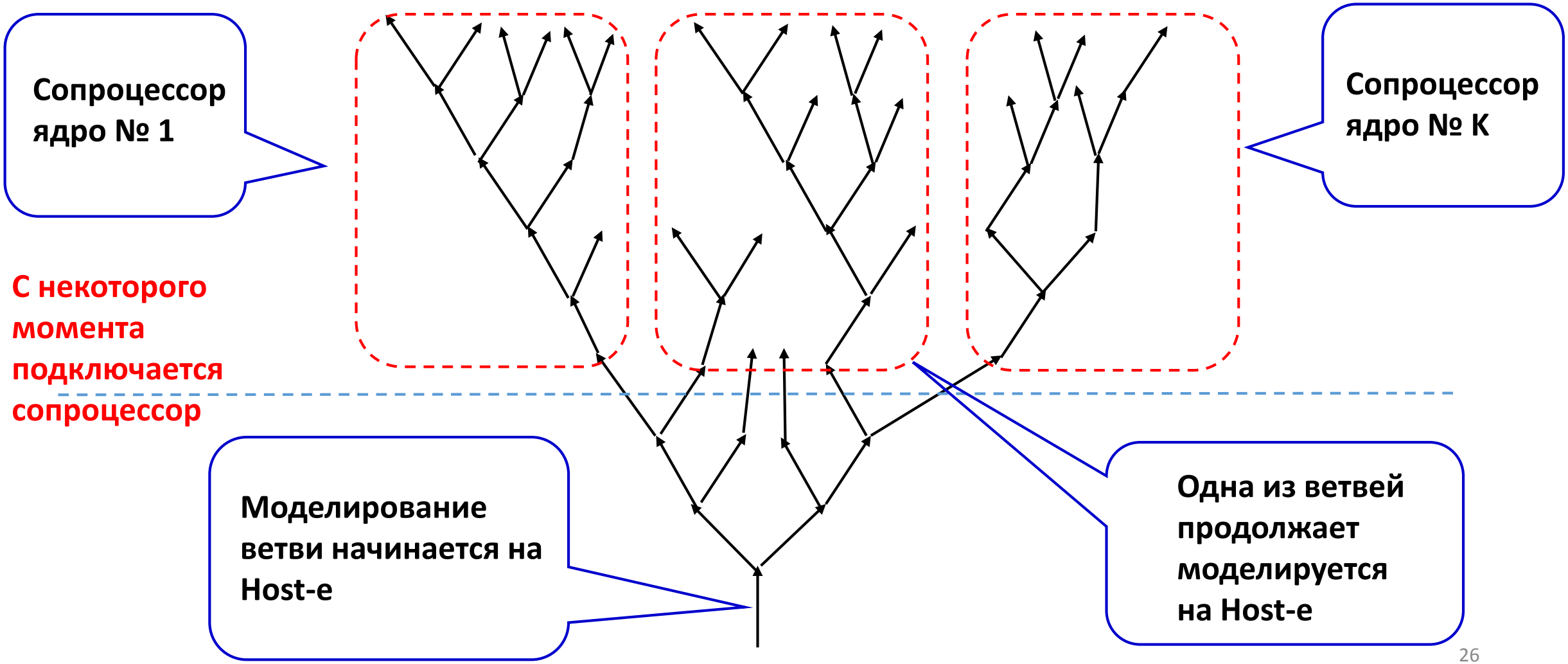
Ускорение расчета реализаций лавины

- Методика **мелкозернистого распараллеливания** для рассматриваемой задачи заключается в моделировании отдельной реализации электронной лавины на одном многоядерном процессоре **с общей памятью**, например, на графическом сопроцессоре[1] или сопроцессоре Intel Xeon Phi.

[1] Жуковский М.Е., Усков Р.В. // Выч. методы и программирование, 2012, Т.13, №1, с. 189-197.

Параллельная реализация

Моделирование условно-независимых частей лавины частиц распределяется по ядрам сопроцессора.



Параллельная реализация

Что выбрать: Intel Xeon Phi или Nvidia GPU

для мелкозернистого распараллеливания?

- Графические процессоры Nvidia GPU не использовались, т.к. «нити» («ветви» в лексикографической схеме) недостаточно легкие и нельзя добиться синхронности выполнения операций при моделировании «ветвей».
- У Intel Xeon Phi у ядер большая общая память, возможен быстрый обмен данными между ядрами, асинхронность выполнения операций на разных ядрах не снижает эффективность распараллеливания.

Параллельная реализация

Особенности счета на Intel Xeon Phi

- На Intel Xeon Phi можно быстро организовать перераспределение вычислительной нагрузки между ядрами и выделить свободные ядра с целью эффективного моделирования маловероятных событий.
- В случае большого числа частиц в лавине ядра обмениваются «избыточными» частицами через общую память, при необходимости передают их на Host, который сохраняет их на диск для дальнейшей обработки.

Такой подход позволяет существенно повысить эффективность по сравнением с крупнозернистым распараллеливанием – возможность получить заданное число реализаций за заданное время.

Параллельная реализация

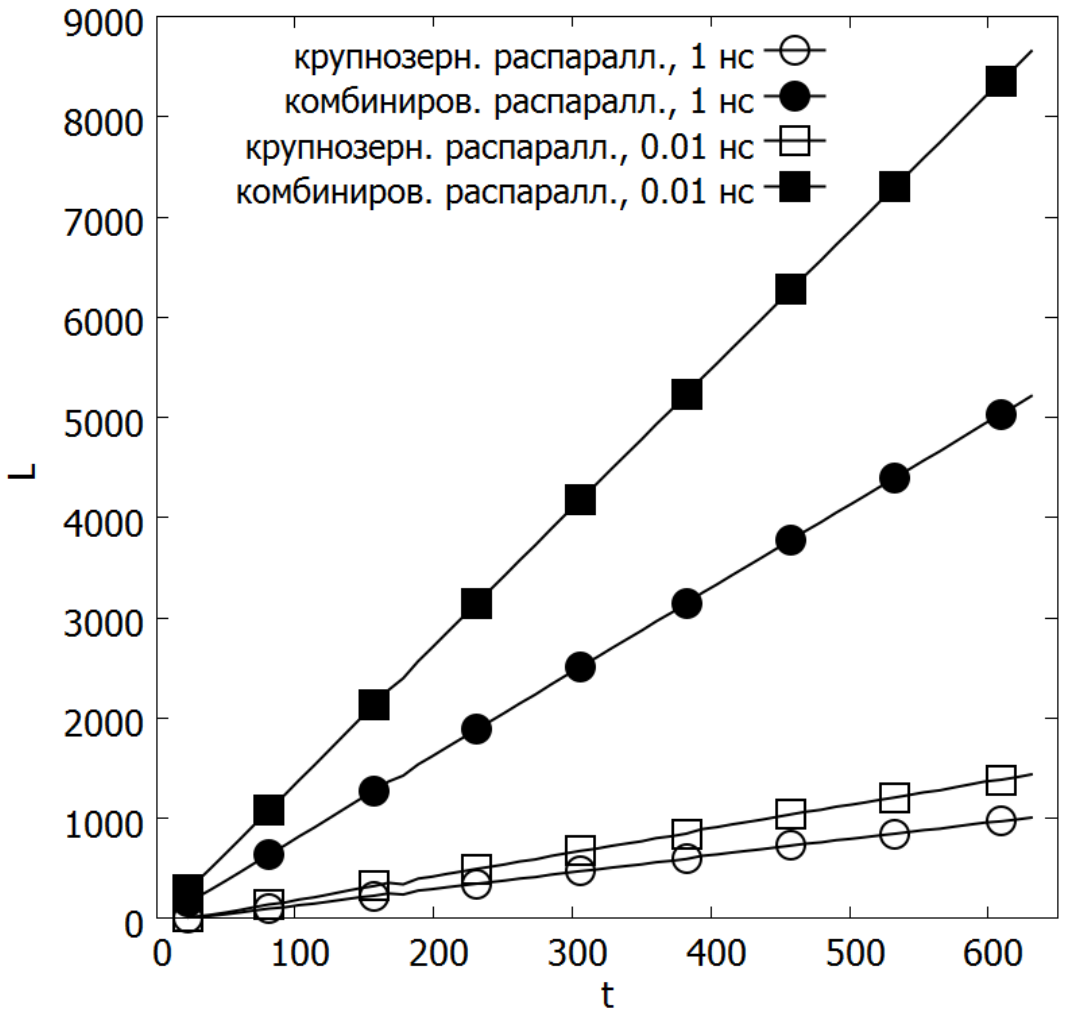
- Поскольку узлы гибридного кластера имеют в своем составе разные вычислители (CPU-ядра и сопроцессоры), то целесообразно **комбинировать крупно- и мелкозернистое распараллеливание** следующим образом:
  - На каждом вычислительном узле часть CPU-ядер будет моделировать реализации согласно методике крупнозернистого распараллеливания.
  - Сопроцессоры узла (и «прикрепленные» к ним CPU-ядра) будут моделировать реализации лавины по методике мелкозернистого распараллеливания.

Параллельная реализация

Расчеты на кластере МВС-10П:

- На каждом вычислительном узле использовались два 8-ми ядерных процессора Intel® Xeon® E5-2690 и два 60-ти ядерных сопроцессора Intel Xeon Phi SE10X.
- Использовался offload-режим исполнения задач на сопроцессоре.

Параллельная реализация



Сравнение двух методик распараллеливания. По горизонтальной оси -машинное время в секундах, по вертикальной оси –количество реализаций

Спасибо за внимание!