

Аннотация

Моделирование динамики плазмы является актуальной научной задачей, для выполнения которой активно применяются СуперЭВМ. Для повышения эффективности применения систем высокопроизводительных вычислений необходимо точно оценивать вычислительные возможности применяемой СуперЭВМ. К сожалению, наиболее применяемый инструментарий для данной задачи: High Performance Linpack Benchmark, не дает исчерпывающего представления о реальной устойчивой производительности НРС-систем, в связи с тем, что использует устаревшие методы. Используя метод Particle-in-Cell, который широко применяется в физике плазмы и других областях моделирования частиц, был разработан программный комплекс, выполняющий перечисленные выше задачи.

Тема работы

Разработка программного комплекса решения задач численного моделирования плазмы для определения производительности СуперЭВМ.

Состав коллектива

- Смирнов Александр Владиславович, ФГБОУ ВО «КГТУ», студент магистратуры 2 курса;
- Шикота Илья Алексеевич, ФГБОУ ВО «КГТУ», студент магистратуры 2 курса;
- Штерцер Вадим Дмитриевич, ФГБОУ ВО «КГТУ», студент магистратуры 2 курса;
- Снытников Алексей Владимирович, ФГБОУ ВО «КГТУ», профессор, д.т.н.

Научное содержание работы

Постановка задачи

Целью работы являлась разработка программного комплекса для решения задач численного моделирования динамики плазмы с целью измерения производительности СуперЭВМ. Для достижения поставленной цели были решены следующие **задачи**:

- Выбор методики моделирования динамики плазмы, основанной на использовании различных численных

методов, применяемых в методе PIC для моделирования поведения плазмы в электрическом поле;

- Разработка программного комплекса решения задач численного моделирования физики плазмы и определения производительности СуперЭВМ на основе выбранной методики.

Современное состояние проблемы

Наиболее широко используемый инструмент для оценки производительности высокопроизводительных вычислений, High Performance Linpack Benchmark (HPL), не дает полного представления о достижимой устойчивой производительности таких систем. Это ограничение возникает потому, что HPL решает только системы линейных уравнений и не дает никакого представления о том, насколько хорошо система работает с другими алгоритмическими методами. Более того, сосредоточенность HPL на узком наборе операций не позволяет учесть разнообразные рабочие нагрузки, с которыми сталкиваются современные приложения HPC. Следовательно, необходимо создать более точный метод оценки производительности, который бы включал в себя различные вычислительные методы и учитывал ограничения существующих бенчмарков.

Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы

Моделирования динамики плазмы в данной работе осуществляется следующим образом:

1. Инициализация начальных координат частиц реализована на основе квази-случайной последовательности Халтона с методом перемешивания Овена. Данный метод позволяет инициализировать координаты частиц с минимальными артефактами сетки, и сохраняет естественную стохастичность частиц;
2. Инициализация скоростей частиц происходит согласно распределению Максвелла-Больцмана для трёхмерного пространства, которое описывает статистическое распределение скоростей в идеальном газе при заданной температуре. Это распределение характеризуется гауссовым

- профилем по каждой компоненте скорости и параметризуется температурой;
3. Расчёт плотности заряда происходит с помощью метода облака в ячейках, так как данный метод обеспечивает хороший баланс между точностью и вычислительной эффективностью;
 4. Для расчёта электрического поля применяется спектральный метод. Данный метод имеет высокую точность, и благодаря быстрому преобразованию Фурье, низкую вычислительную сложность;
 5. Интерполяция электрического поля на частицы происходит с помощью метода облака в ячейках, поскольку весовые функции обычно должны совпадать с теми, что применяются при проецировании заряда частиц на сетку, для обеспечения взаимной согласованности операций проекции и интерполяции для сохранения физических процессов;
 6. Обновление координат и скоростей частиц реализовано с помощью алгоритма Бориса, выбор обусловлен тем, что данный метод является стандартом в численном моделировании плазмы благодаря своей точности, устойчивости и способности сохранять физические эффекты плазмы, что особенно важно при длительном моделировании и больших временных шагах.

Полученные результаты

1. Очередь bl2x220g7q, 24 ядра
 - a. время выполнения: 119.41 с.
 - b. количество использованной памяти: 24 ГБ
2. Очередь xl230g9, 24 ядра
 - a. время выполнения: 101.43 с.
 - b. количество использованной памяти: 24 ГБ
3. Очередь dl560g10q, 24 ядра
 - a. время выполнения: 92.82 с.
 - b. количество использованной памяти: 24 ГБ

После проведения исследования масштабирования были сделаны следующие выводы о производительности если бы были задействованы все ресурсы кластера:

1. Очередь bl2x220g7q
 - a. время выполнения: ≈ 13.47 с.
 - b. количество использованной памяти: 240 ГБ
2. Очередь xl230g9
 - a. время выполнения: ≈ 7.33 с
 - b. количество использованной памяти: 456 ГБ
3. Очередь dl560g10q
 - a. время выполнения: ≈ 4.54 с.
 - b. количество использованной памяти: 720 ГБ

Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Использование кластерной системы ИВЦ НГУ позволило провести экспериментальное измерение производительности на используемой кластерной системе. Кластер предоставил доступ к различным конфигурациям вычислительных узлов, что дало возможность исследовать масштабируемость разработанного ПО.

Впечатления от работы комплекса и деятельности ИВЦ НГУ, а также предложения по их совершенствованию

Впечатления от работы с кластерной системой ИВЦ НГУ положительные. Единственная проблема которая возникала во время использования кластера была оперативно решена. За что хотелось бы выразить благодарность сотрудникам центра.