

# Суперкомпьютерное моделирование лазерной плазмы с использованием программного комплекса PICADOR

С.И. БАСТРАКОВ<sup>1</sup>, А.В. КОРЖИМАНОВ<sup>1,2</sup>, И.Б. МЕЕРОВ<sup>1</sup>, А.В. БАШИНОВ<sup>1,2</sup>, А.А. ГОНОСКОВ<sup>1,2,3</sup>,  
Е.С. ЕФИМЕНКО<sup>1,2</sup>, А.А. МУРАВЬЕВ<sup>1,2</sup>, И.А. СУРМИН<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Кафедра математического обеспечения и суперкомпьютерных технологий  
Института информационных технологий, математики и механики ННГУ

<sup>2</sup>Институт прикладной физики РАН

<sup>3</sup>Чалмерский технологический университет

---

В 2011 году научный мир отмечал 50 лет создания лазера. Да, всего чуть больше полувека прошло, как этот принципиально новый источник света был впервые создан в лаборатории. Сейчас лазерные технологии встречаются нам повсюду – от приводов персональных компьютеров и ручных указок до хирургических операционных и машиностроительных заводов.

Лазерные системы продолжают непрерывно развиваться. Одним из наиболее бурных направлений такого развития на протяжении всей истории существования лазеров является увеличение пиковой мощности генерируемых импульсов. С каждым годом учёным удаётся создавать новые и новые всё более мощные лазерные комплексы, интенсивность излучения которых растёт по закону, аналогичному закону Мура, то есть экспоненциально. На данный момент зарегистрированная рекордная мощность отдельного импульса уже достигла совершенно невероятных величин – сотни тераватт (то есть триллионов ватт), она в десятки раз превосходит суммарную мощность всех электростанций мира. Конечно, и длительность импульсов измеряется всего лишь десятками фемтосекунд, то есть квадриллионными долями секунды, так что их энергия относительно невысока.

Вещество, поверхность которого облучается таким излучением, начинает проявлять совершенно удивительные свойства. Во-первых, оно мгновенно ионизируется, образуя плотную плазму. Такое состояние интересно само по себе, и другими методами получить его или невозможно, или чрезвычайно сложно. Но что ещё интереснее, частицы этой плазмы, попадая в поле лазерного импульса, начинают колебаться с огромными энергиями, их скорости приближаются к скорости света. Последнее обстоятельство приводит к ряду очень интересных эффектов. Например, непрозрачная изначально тонкая металлическая плёнка вдруг становится прозрачной. Или расходящийся в обычных условиях лазерный пучок начинает вдруг самофокусироваться в такой плазме и образовывать тонкие филаменты – что-то вроде естественных световодов.

При этом исследования в области физики взаимодействия сверхмощного лазерного излучения с веществом носят не только фундаментальный теоретический характер. Имеется целый ряд важных приложений разрабатываемых технологий. Лазерная плазма является источником пучков высокоэнергичных частиц – электронов, протонов и других ионов, а также импульсов рентгеновского и гамма-излучения, в том числе импульсов аттосекундной длительности (то есть в тысячу раз более коротких, чем упоминавшиеся выше фемтосекундные лазерные импульсы). Такие, как их называют, вторичные источники частиц и излучения востребованы в онкотерапии, биоимиджинге, мониторинге ядерных отходов, атомной и ядерной физике и в других областях.

Сложность изучения описанной выше лазерной плазмы заключается в том, что эта система является сильно нелинейной. Это означает, что когда мощный лазерный импульс создаёт плазму, она тоже начинает влиять на импульс, модифицируя его, изменяя его форму, спектр и другие характеристики. Да и само поведение созданной плазмы невозможно описать простыми уравнениями в рамках стандартных подходов. Поведение такой системы оказывается зависящим от большого количества параметров, многие из которых сложно или невозможно контролировать в экспериментах. Всё это делает теоретическое моделирование сильно затруднённым. Аналитические подходы позволяют решать только сильно упрощённые задачи, давая лишь самое общее понимание протекающих процессов, а реалистичное численное моделирование требует высокопроизводительных вычислений и мощностей современных суперкомпьютеров.

Особо большую роль численное моделирование в физике лазерной плазмы приобрело в последние два десятилетия, когда вычислительные мощности компьютеров позволили в известных приближениях рассчитывать задачи, более-менее близкие к реальному эксперименту. Сегодня есть возможность моделировать отдельные классы задач в полностью трёхмерной геометрии с реалистичными параметрами. Численные методы в этой области физики стали неотъемлемой частью не только теоретических исследований, но и экспериментальных кампаний, частично заменив отдельные подготовительные эксперименты.

**1. Общая характеристика подхода.** В основе подавляющего большинства используемых программ для численного моделирования лазерной плазмы лежит метод, известный как Particle-in-Cell, обычно переводимый на русский как «метод частиц в ячейках» [1] и часто для краткости именуемый просто PIC. Основанные на нём программы принято называть PIC-кодами.

Идея метода заключается в том, что моделируемый газ (или плазма, которая является просто ионизированным газом) представляется как набор некоторого достаточно большого количества взаимодействующих частиц. Вообще говоря, данная идея является вполне естественной, поскольку настоящий газ также состоит из большого количества частиц. Однако в реальности число частиц столь велико (около  $10^{18}$  в кубическом сантиметре), что промоделировать их движение на компьютере в полном объёме невозможно. Поэтому в PIC-методе каждая частица – это так называемая макрочастица, соответствующая сразу большому количеству настоящих частиц с близкими параметрами. Точность моделирования при этом, фактически, определяется тем, насколько много макрочастиц удаётся включить в расчёт. На современных суперкомпьютерах это число может достигать нескольких миллиардов.

Схема PIC-метода, применяемая для моделирования плазмы, проста и может быть приравнена в виде четырёх этапов (рисунок 1). На первом этапе происходит расчёт движения частиц в заданных электрических и магнитных полях, на втором этапе – процедура вычисления распределения токов и зарядов, создаваемых частицами (так называемое «взвешивание» частиц). На третьем этапе по вычисленным на предыдущем этапе токам и зарядам производится расчёт новой конфигурации электромагнитных полей. И наконец, на четвёртом этапе выполняется «взвешивание» полей, то есть определение их величины в точках, где располагаются частицы. На следующем шаге все четыре этапа повторяются. В результате рассчитывается самосогласованная динамика плазмы с учётом собственных полей.



Рисунок 1.

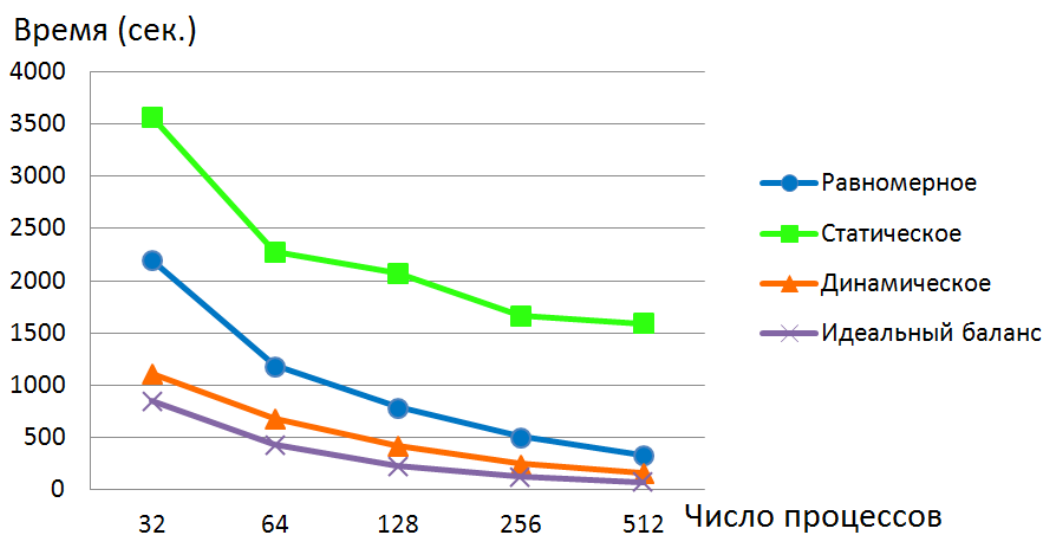
Общая схема работы PIC-кода

**2. Программный комплекс PICADOR.** Программный комплекс для моделирования плазмы PICADOR [2, 3, 5] разрабатывается коллективом сотрудников ННГУ и ИПФ РАН с 2010 года. Он ориентирован на решение больших задач в области моделирования лазерной плазмы на гетерогенных кластерных системах с использованием многоядерных центральных процессоров, графических процессоров и сопроцессоров Intel Xeon Phi [3].

PICADOR использует метод частиц в ячейках с многочисленными расширениями для повышения точности и учета дополнительных физических эффектов. Поддерживаются конечно-разностные схемы FDTD [4] и NDF для численного интегрирования уравнений поля, генерация лазерного импульса на границе, периодические и поглощающие граничные условия, метод Бориса для интегрирования уравнений движения, формфакторы частиц первого и второго порядка, схема взвешивания токов Езиркепова, бегущее окно, а также динамическая балансировка нагрузки [5].

Решение больших задач с использованием кластерных систем предполагает распараллеливание на двух уровнях: на уровне узлов кластера и внутри узла. В программном комплексе PICADOR используется декомпозиция задачи по территориальному принципу: каждый узел кластера обрабатывает часть расчетной области и хранит значения поля и данные частиц, находящиеся в обрабатываемой подобласти. Для обмена данными между узлами используется MPI. На уровне одного узла вычисления также производятся параллельно на многоядерных центральных процессорах и сопроцессорах Intel Xeon Phi с использованием технологии OpenMP, на графических процессорах с использованием NVIDIA CUDA и сопроцессорах Xeon Phi.

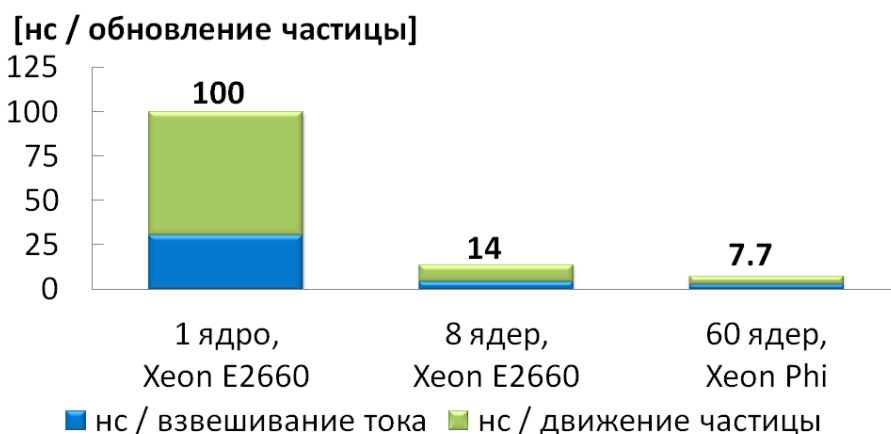
Программный комплекс PICADOR масштабируется на большое количество узлов кластерной системы. Эффективность сильной масштабируемости PICADOR достигает 90% с 16 до 1024 ядер. Используется динамическая балансировка нагрузки между процессами, основанная на прямолинейной декомпозиции (рисунок 2).



**Рисунок 2.**

Время работы в зависимости от количества процессов и способа балансировки нагрузки на модельной задаче моделирования разогретого шара плазмы. Под идеальным балансом понимается задача с тем же количеством частиц, равномерно распределенных по расчетной области

Основными направлениями оптимизации на уровне узла кластера являются повышение эффективности работы с памятью и векторизация кода. Выполнение данных оптимизаций привело к ускорению в 5 раз на центральных процессорах и в 9 раз на сопроцессорах Xeon Phi. Эффективность сильной масштабируемости с 1 до 16 ядер центральных процессоров на общей памяти составляет 99%, для Xeon Phi эффективность масштабируемости с 1 до 60 ядер составляет 78%. Ускорение при использовании сопроцессора Xeon Phi составляет около 2 раз по сравнению с 8-ядерным центральным процессором (рисунок 3). Разрабатывается гетерогенная версия кода, позволяющая задействовать в расчетах и центральные процессоры, и ускорители вычислений.



**Рисунок 3.**

Время работы на центральном процессоре и сопроцессоре Xeon Phi в расчете на одну частицу и одну итерацию по времени

Версия для графических процессоров разработана с использованием технологии NVIDIA CUDA. Реализация оптимизирована с использованием возможностей различных

уровней памяти GPU и высокоэффективных атомарных операций. При использовании одинарной точности ускорение на графическом процессоре NVIDIA GTX 680 архитектуры Kepler относительно 8-ядерного CPU составляет около 10 раз.

**3. Основные выводы.** Программный комплекс для моделирования плазмы PICADOR разрабатывается коллективом сотрудников ННГУ и ИПФ РАН и используется для решения вычислительно трудоемких задач численного моделирования плазмы на кластерных системах.

С точки зрения научного задела в области вычислительной физики комплекс PICADOR создается на основе предшествующего многолетнего опыта разработки и использования кода ELMIS, который позволил аккумулировать значительные достижения в применении подхода частиц в ячейках в целом ряде конкретных приложений физики лазерной плазмы. Кроме этого, код PICADOR вобрал многие достижения последних лет, полученные другими группами, занятыми в соответствующей области разработки вычислительных средств. Число пользователей PICADOR неуклонно возрастает. Предложенный авторами подход по расширению областей применения кода заключается в использовании унифицированного интерфейса Module Development Kit (MDK), который позволяет не только использовать, но и разрабатывать дополнительные модули, отвечающие за те или иные физические явления. В результате в настоящее время программный комплекс поддерживает множество расширений метода частиц в ячейках и схем повышенной точности, что позволяет производить моделирование широкого круга задач физики плазмы. Развивается сотрудничество с учеными из ИПФ РАН, Лундского университета, университета города Умео, Чалмерского технологического университета.

Отличительной особенностью PICADOR является ориентация на широкий спектр вычислительных устройств: многоядерные центральные процессоры, сопроцессоры Intel Xeon Phi, графические процессоры. Расчеты ведутся с использованием суперкомпьютеров «Лобачевский» (ННГУ), МВС-100К, МВС-10П (МЦЦ РАН), «Ломоносов» (МГУ), Akka, Abisko (HPC Center North). В дальнейшем планируется дополнять программный комплекс новыми расширениями метода частиц в ячейках и численными схемами, а также продолжать работать над повышением производительности и масштабируемости.

Программный комплекс PICADOR активно эксплуатируется научными сотрудниками ННГУ и ИПФ РАН. С его помощью был решён ряд актуальных задач современной физики плазмы. В частности, была показана возможность эффективной генерации пучка высокоэнергичных многозарядных ионов при облучении структурированных твердотельных мишеней; был обнаружен новый режим взаимодействия в условиях доминирования радиационных потерь – так называемый аномальный радиационный захват; был проведён ряд работ по исследованию динамики взаимодействия в условиях развития квантово-электродинамических каскадов – электрон-позитронных лавин, рождающихся в сверхсильных полях. Результаты этих работ опубликованы в престижных физических журналах.

Работа частично поддержана РФФИ (гранты 14-07-31211 и 15-37-21015) и грантом МОН РФ (соглашение от 27 августа 2013 г. № 02.В.49.21.0003 между МОН РФ и ННГУ им. Н.И. Лобачевского).

---

## Литература

---

1. Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование: Пер. с англ. М.: Энергоатомиздат, 1989.

2. Bastrakov S., Donchenko R., Gonoskov A., Efimenko E., Malyshev A., Meyerov I., Surmin I. Particle-in-Cell Plasma Simulation on Heterogeneous Cluster Systems // Journal of Computational Science. 2012. 3. 474–479.

3. Bastrakov S., Meyerov I., Surmin I., Efimenko E., Gonoskov A., Malyshev A., Shiryayev M. Particle-in-Cell Plasma Simulation on CPUs, GPUs and Xeon Phi Coprocessors / J.M. Kunkel, T. Ludwig, and H.W. Meuer (Eds.): ISC 2014, LNCS. 2014. 8488. 513–514.

4. Taflove A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. London: Artech House, 1995.

5. Бастраков С.И., Мееров И.Б., Сурмин И.А., Гоносков А.А., Ефименко Е.С., Малышев А.С., Ширяев М.А. Динамическая балансировка в коде PICADOR для моделирования плазмы // Вычислительные методы и программирование. 2013. 14. С. 67–74.

