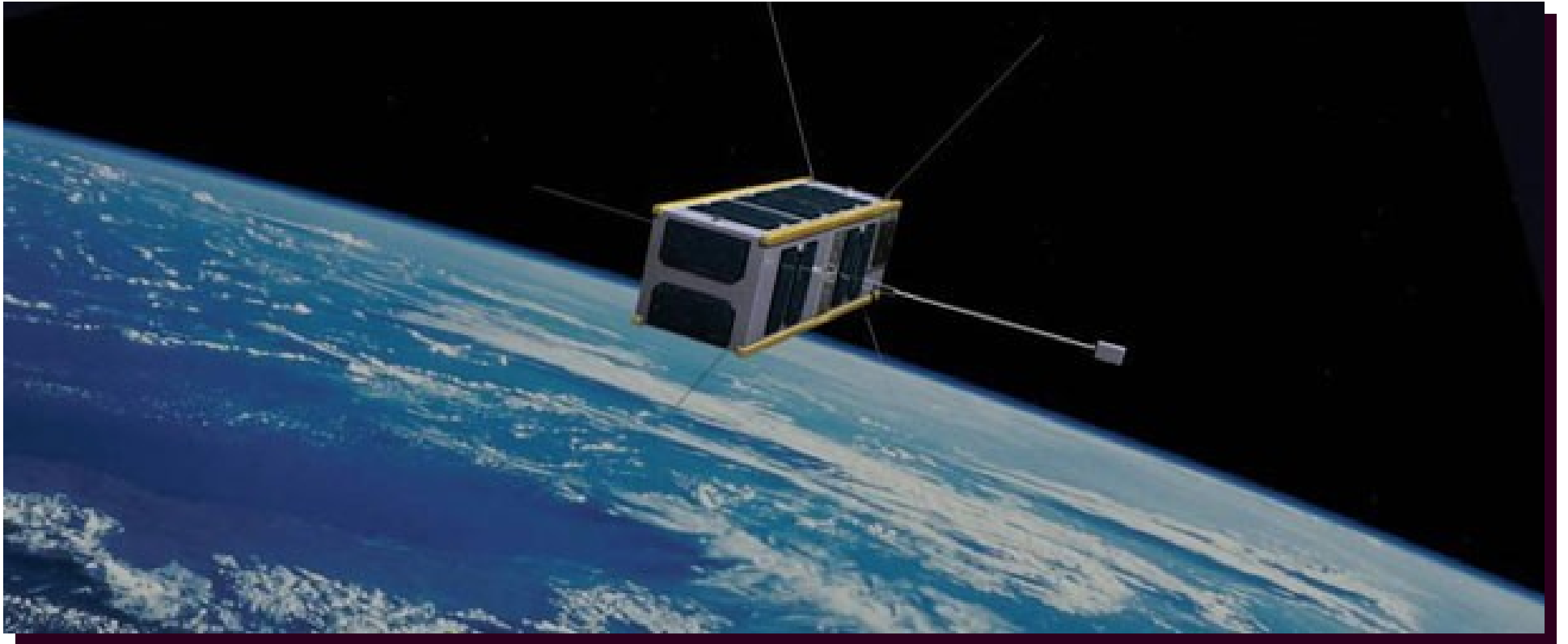


Использование гибридных кластерных систем для моделирования взаимодействия спутника и плазмы методом молекулярной динамики.

Л.В. Зинин, А.А. Шарамет, С.А.Ишанов

Мотивация



Корректировка полученных экспериментальных данных и их интерпретация.

Существующие подходы

Гидродинамический подход

- Моделирование при концентрации частиц от 10^5 см^3

Particle in Cell

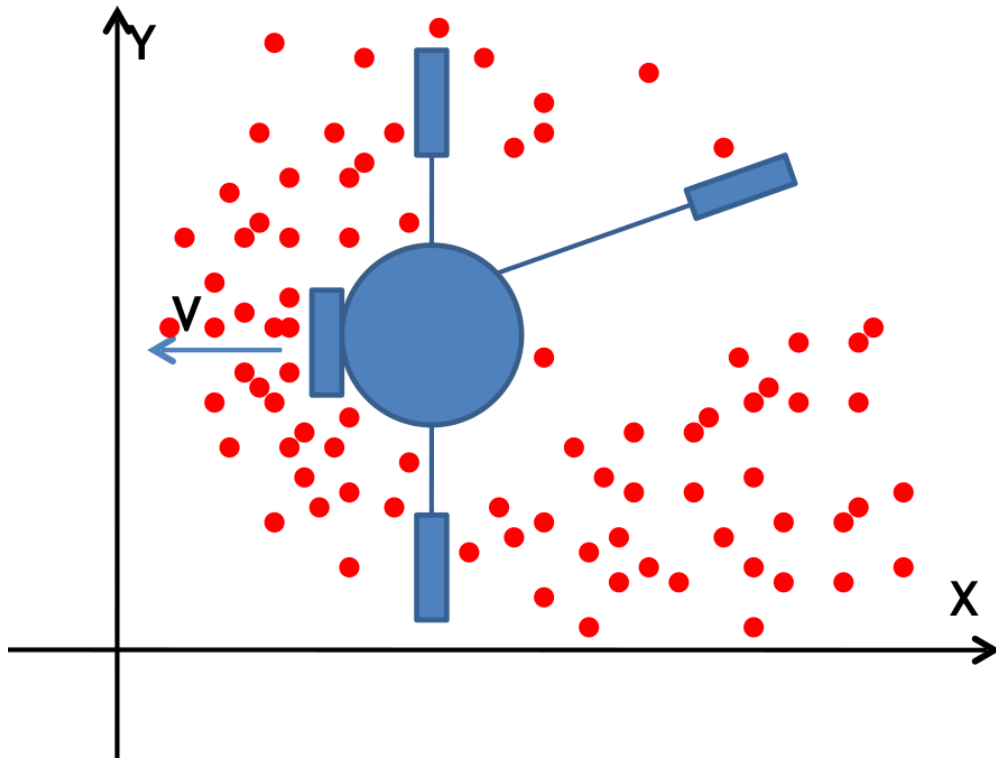
- Моделирование при концентрации частиц от 10^3 см^3

В высоких слоях ионосферы наблюдаются концентрации от 1 до 10^3 см^3

Предлагаемый подход

- молекулярная динамика

Постановка задачи



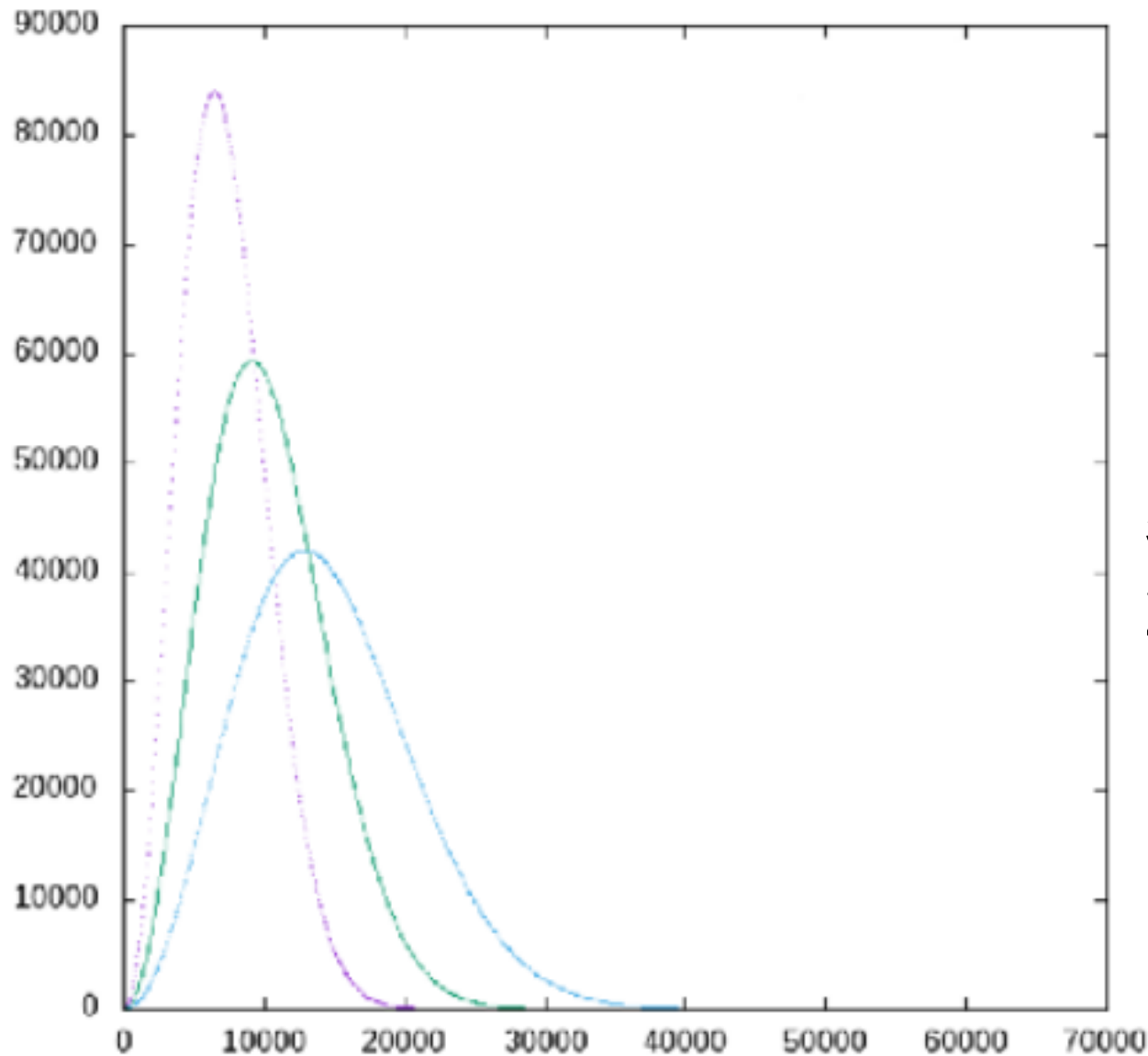
Спутник(сфера радиусом 0.2 м) движется в ионосфере земли, вдоль оси X со скоростью V =(от 8- до 20) км/с. Окружающее пространство состоит из двухкомпонентной плазмы: ионов H^+ или O^+ , и электронов.

Температура плазмы: 3500-5000К.

Потенциал спутника: 1.8-5 В

Размер моделируемой области: $2 M^3$

Начальное распределение скоростей по Максвеллу



10 000K
5 000K
2 500K

Молекулярная динамика

$$m \vec{a} = q \vec{E} + q [\vec{V} \times \vec{H}]$$

$$\vec{E} = \sum_{i=1}^n \frac{q \vec{r}}{r^3}$$

m – масса частицы

a – ускорение частицы

q – заряд частицы

V – вектор скорости

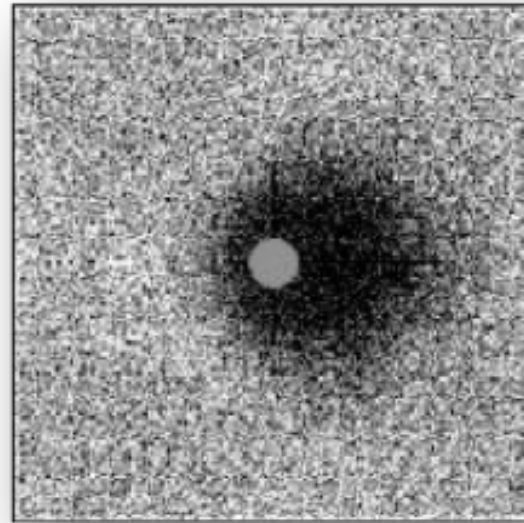
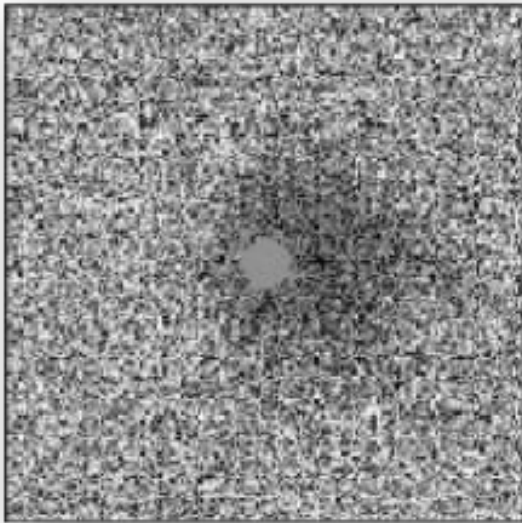
E – вектор напряжённости электрического поля

H – вектор напряжённости магнитного поля

n - количество частиц

Время решения задачи порядка 3000-7000 итераций с шагом 10^{-8} c^{-1}
(порядка плазменной частоты)

Влияние концентрации на ионную тень(2D)



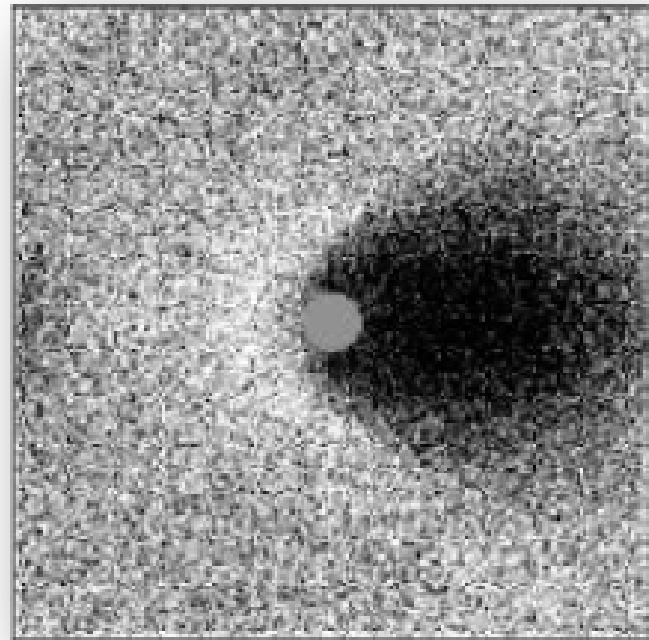
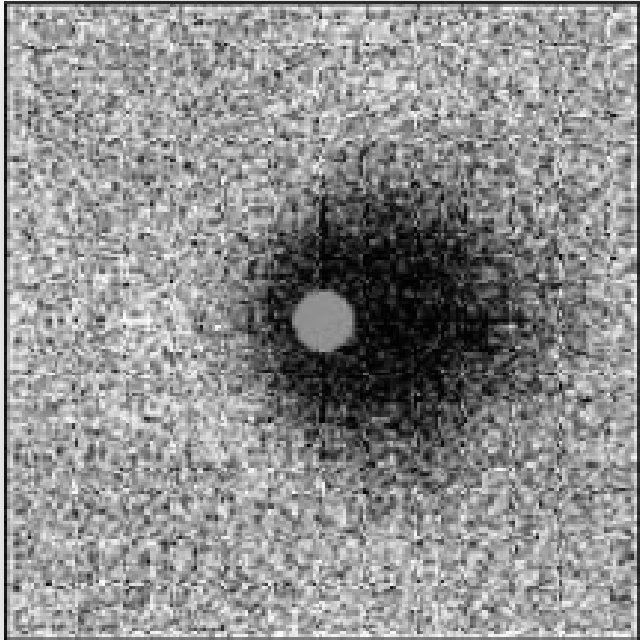
Ионы водорода и электроны.

Цвет отмечает заряд в точке (положительный - белый, отрицательный - чёрный)

Слева концентрация 10 частиц в $См^2$, справа 100 частиц в $См^2$.

Скорость спутника 8 км/с.

Влияние скорости спутника на ионную тень(2D)

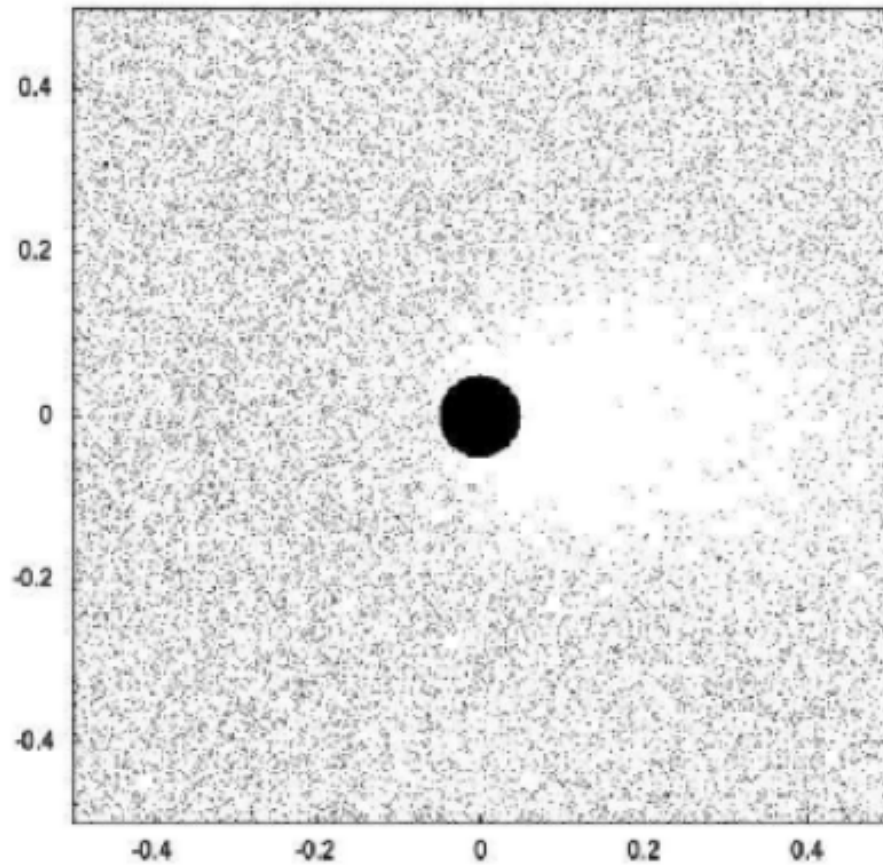


Слева скорость спутника 8 км/с, справа 20 км/с. Концентрация 100 частиц в $См^2$

Образование ионной тени 3D

Ионы кислорода и электроны.

В центре спутник, чёрные точки - ионы кислорода



Концентрация частиц:
10 частиц в См^3

Скорость спутника:
5 км/с

Пространство и сложность

Концентрация в $См^2 / См^3$	Тип пространства	Количество частиц (ребро 2м)	Количество частиц (ребро 10м)	Количество уравнений (ребро 10м)	Сложность алгоритма (ребро 10м)
10	2D	$4 * 10^5$	10^7	10^{14}	10^{17}
100	2D	$4 * 10^6$	10^8	10^{16}	10^{19}
10	3D	$8 * 10^7$	10^{10}	10^{20}	10^{23}
1000	3D	$8 * 10^9$	10^{12}	10^{24}	10^{27}

Дебаевский радиус – расстояние на которое распространяется действие электрического поля в **квазинейтральной** среде.

При упаковке частиц по группам, 36 байт для описания частицы.

2.8 Гб на первой задаче 3D

36 терабайт на потенциальной задаче

Применяемый подход

- GPU

- Grid формируется не из потребностей задачи, а из предположений о hardware
- Нить вычисляет $i * \text{sizeof}(\text{grid})$ частицы
- shared memory для линейки считанных частиц

- Проблема нехватки регистров решается разделением на по категориям(электроны на электроны, электроны на протоны, протоны ...)

Применяемый подход

- Multy GPU per node

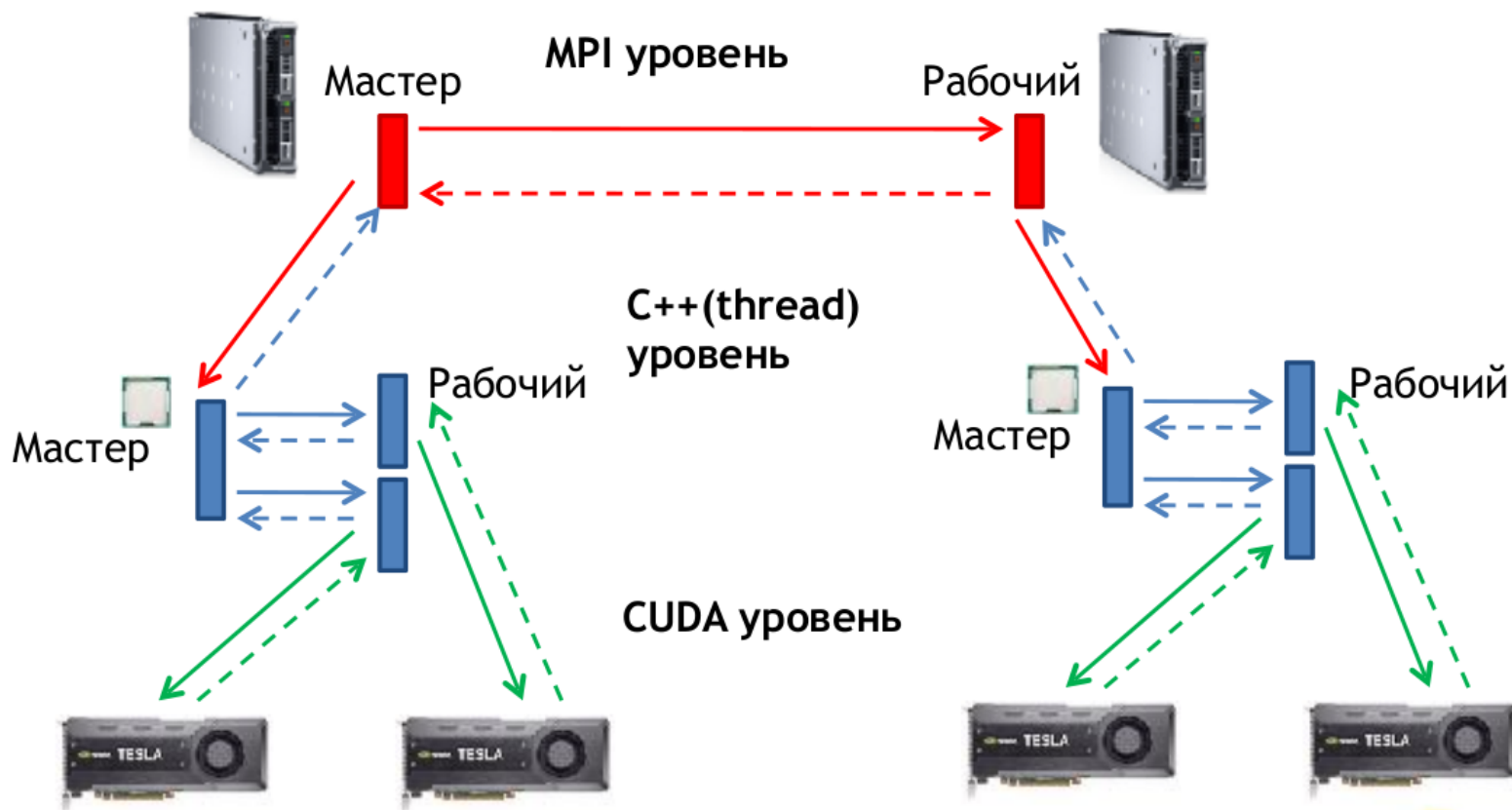
(Решение задачи представляет собой схему хранения двух полей: текущее и вычисляемое).

- Входное поле(или сегмент) дублируется в DRAM
 - Выходное поле (каждый элемент пишется один раз) храним в общей zero-сору памяти.
- Два CPU потока следят за загрузкой GPU, один координирует их действия, занимается IO с диска.

Применяемый подход

- MPI + threads + CUDA
 - zero-copy и mpi buffer – одна и та же память.
 - Входные данные итерации тиражируются
 - Выходные данные собираются в единый сегмент на master узле

Схема гетерогенной программы



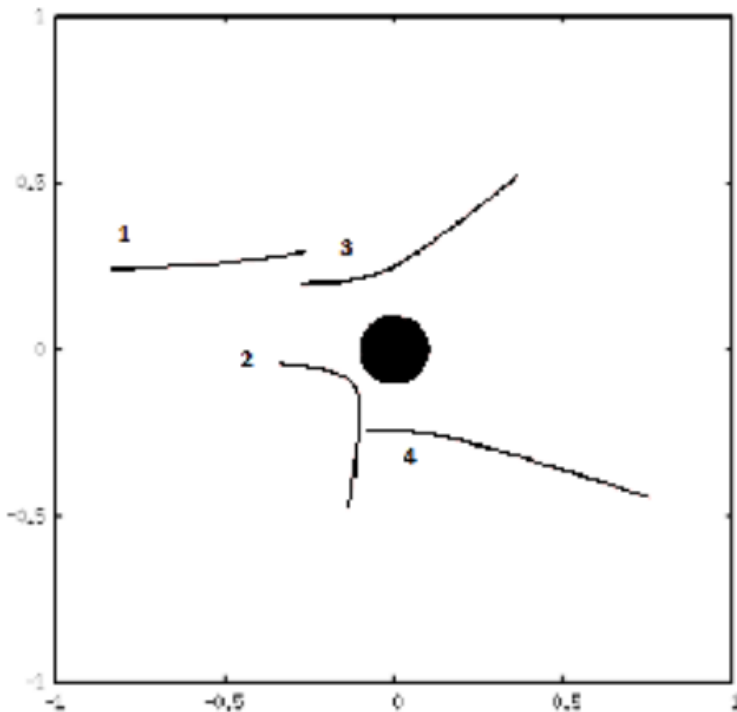
Масштабируемость

Количество частиц	Время на одном GPU(сек)	Время на двух GPU на узле(сек)	Прирост
10^4	0.621	0.567	9%
10^5	4.549	2.923	55%
10^6	44.40	28.69	54%
10^7	338.69	272.00	46%

На последней строке, входные данные перестали помещаться в DRAM

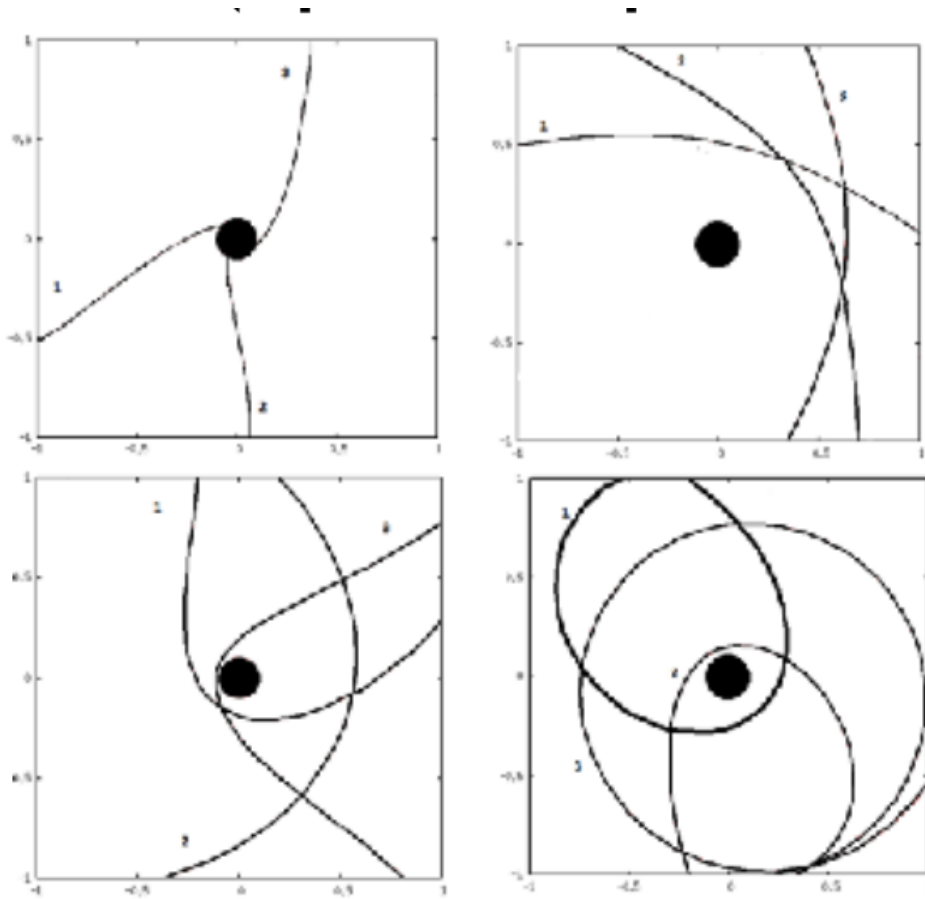
Результаты(траектории ионов)

Траектории движения протонов вблизи спутника в плоскости ХОУ.
Скорость спутника 20 км с⁻¹ направлена вдоль оси Х справа налево.
Значения начальных координат (м) и скоростей протонов (м/сек):



(1)	x= 0.83	y= 0.24	vx= 8300.03	vy= 690.93
(2)	x=-0.33	y= 0.04	vx= 0776.53	vy=-2503.78
(3)	x=-0.27	y= 0.19	vx= 21636.98	vy= -68.12
(4)	x=-0.07	y=-0.24	vx= 21862.95	vy=2452.94

Результаты(траектории электронов)



В зависимости от начальных значений скоростей и координат эти траектории

заканчиваются на поверхности спутника(левый верхний),
имеют форму близкую к параболе(правый верхний) и
гиперболе(левый нижний) или
почти замкнуты и захвачены полем спутника(правый нижний).

Спасибо за внимание