



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

11 февраля 2010

# Использование CUDA в моделировании некоторых физических процессов

С.Б. Ворожцов, А.М. Поволоцкий, И.В. Амирханов,  
В.А. Смирнов, Е.Е. Перепелкин  
Дубна, ОИЯИ

<http://parallel-compute.ru>



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER

# Содержание

- Циклотрон
  - ( постановка задачи: С.Б. Ворожцов, ЛЯП )
- Клеточный автомат
  - ( постановка задачи: А.М. Поволоцкий, ЛТФ )
- Уравнение теплопроводности
  - ( постановка задачи: И.В. Амирханов, ЛИТ )



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER

# Циклотрон

- Постановка задачи
- Численные методы
- Программная реализация на CUDA
- Результаты

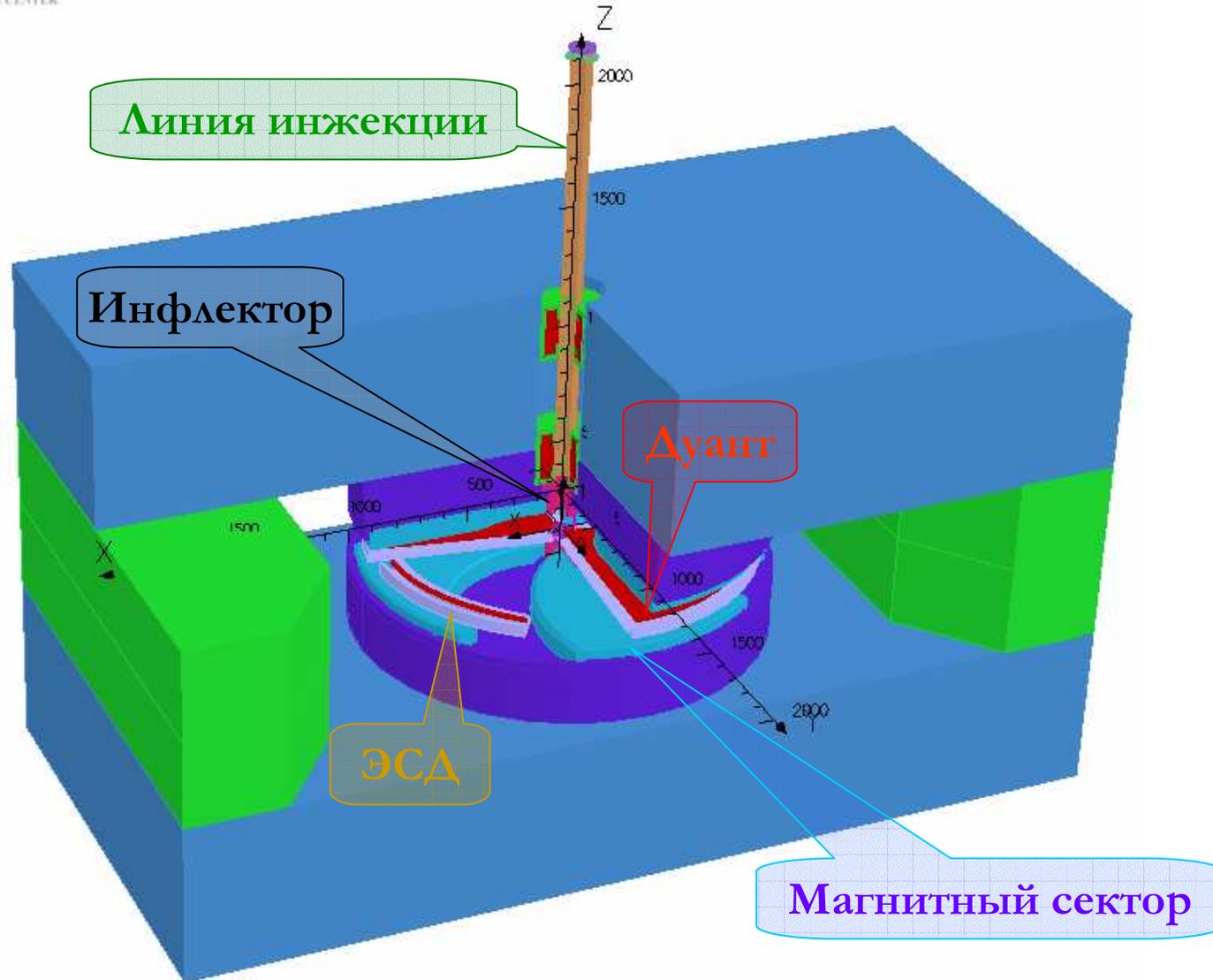
<http://cbda.jinr.ru>

CBDA: Cyclotron Beam Dynamic Analysis code



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING CENTER

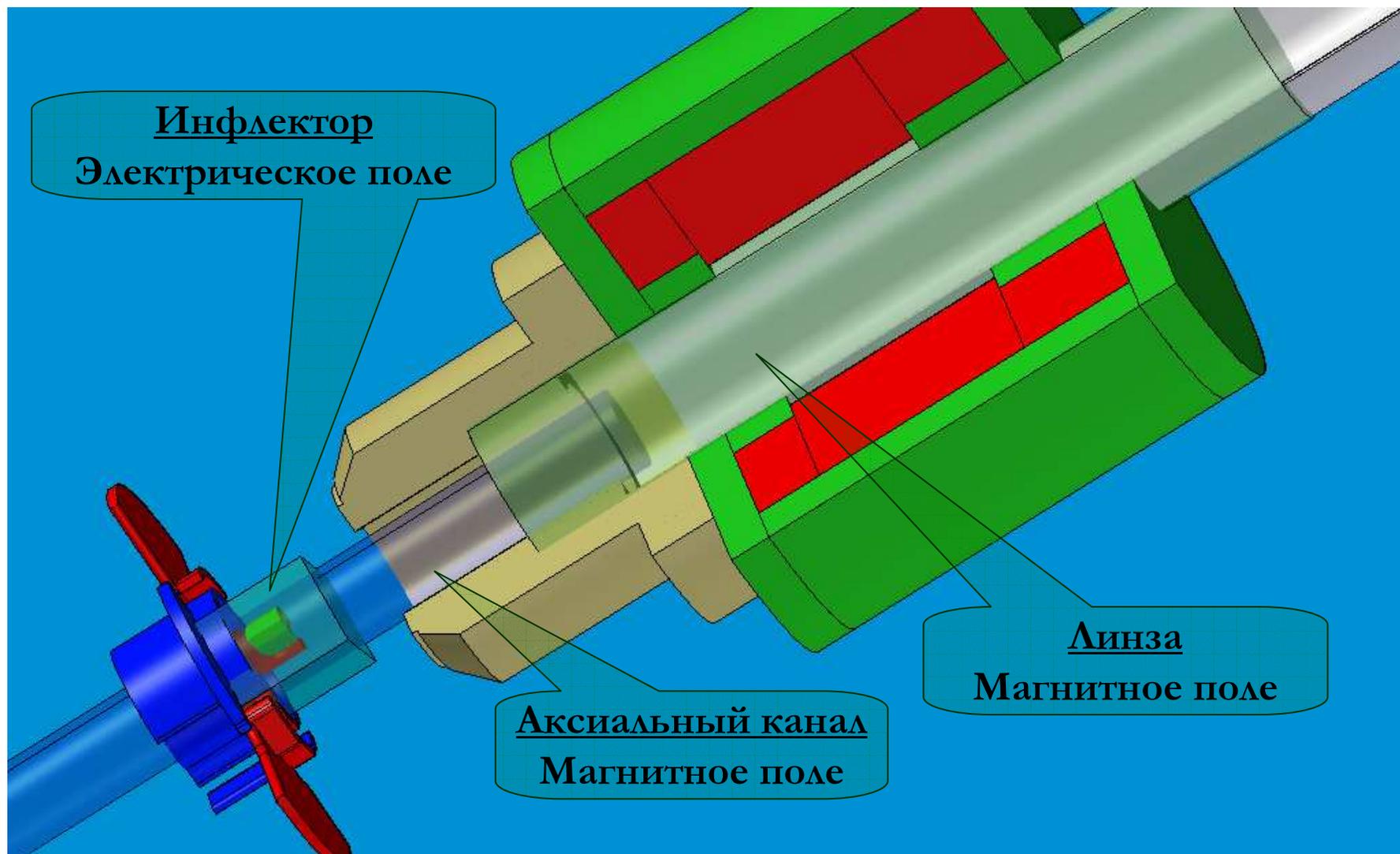
# Компьютерная модель циклотрона





НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING CENTER

# Области задания карт полей





# Уравнения движения

$$(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t), \quad i = 1 \dots N$$

$$\frac{d}{dt} \vec{p}_i = \vec{F}_i, \quad i = 1 \dots N$$

$$\left\{ \begin{array}{l} m_i \frac{d}{dt} (\gamma_i \vec{v}_i) = q_i \left( \vec{E}_{ext}(\vec{r}_i, t) + \vec{E}_s(\vec{r}_i, t) + [\vec{v}_i, \vec{B}_{ext}(\vec{r}_i)] \right) \\ \gamma_i = 1 / \sqrt{1 - \beta_i^2}, \quad \beta_i = \frac{v_i}{c} \\ \vec{r}_i|_{t=t_i} = \vec{r}_i^{(0)}, \quad \vec{v}_i|_{t=t_i} = \vec{v}_i^{(0)}, \quad \text{или} \quad \vec{r}_i|_{t=0} = \vec{r}_i^{(0)}, \quad \vec{v}_i|_{t=0} = \vec{v}_i^{(0)} \\ 1 \leq i \leq N, \quad \vec{r}_i \in V \end{array} \right.$$



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

# Пространственный заряд

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{E}_s &= \frac{\rho}{\varepsilon_0}, & \operatorname{rot} \vec{B}_s &= \mu_0 \vec{J}_s + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}_s \\ \operatorname{rot} \vec{E}_s &= -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}_s, & \operatorname{div} \vec{B}_s &= 0, \quad \frac{1}{\mu_0 \varepsilon_0} = c^2 \end{aligned}$$

## РІС метод

$$\vec{E}_s = -\nabla \varphi$$

$$\begin{cases} \Delta \varphi(p) = -\frac{\rho(p)}{\varepsilon_0}, & p \in \Omega \\ \varphi|_{\Gamma_D} = \varphi_D, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial n}|_{\Gamma_N} = \psi_N, & \Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma \end{cases}$$

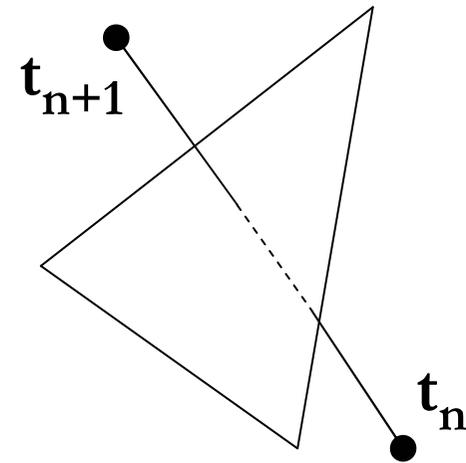
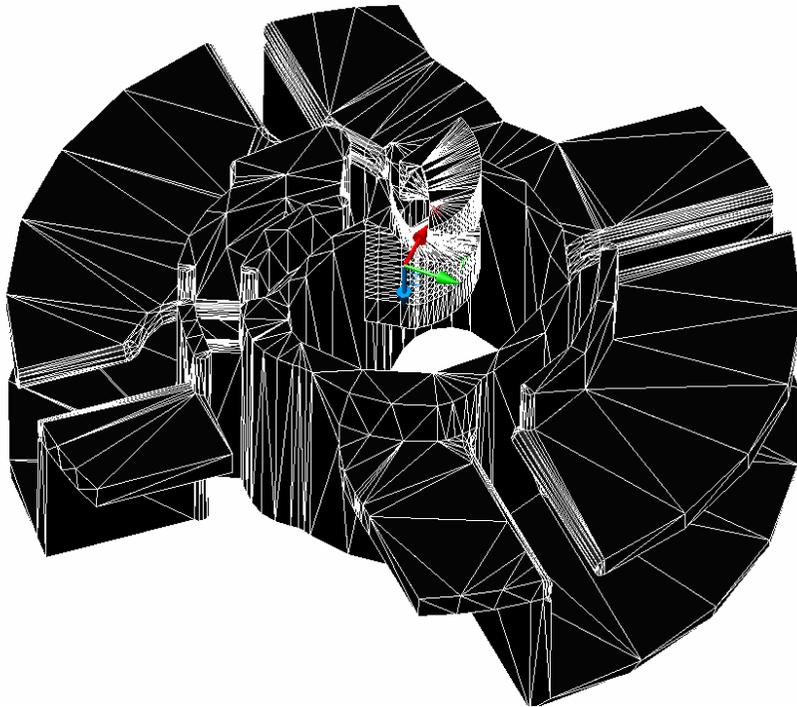
## РР метод

$$\begin{aligned} \vec{E}_s(\vec{r}_i) &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{j \neq i}^N \frac{q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} (\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad i = 1 \dots N \\ \vec{E}_s(j \rightarrow i) &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{q_j}{R^3} (\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad |\vec{r}_i - \vec{r}_j| < R \end{aligned}$$



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

# Потери частиц





НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER

# Ресурсоемкое моделирование

- Необходимость рассмотреть не менее 5 различных конфигураций центральной зоны;
- Необходимость ускорять различные ионы;
- Сложная геометрическая структура;
- Учет пространственного заряда;



Одна итерация требует ~  
несколько дней расчетов



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

# Численные методы

- Метод Рунге - Кутта
  - ( уравнения движения )
- БПФ для краевой задачи
  - ( учет пространственного заряда )
- Оценка потерь пучка
  - ( задача «ray tracing» )



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

# Программная реализация

- **Track** ( карты полей, координаты и скорости частиц )
- **Losses** ( геометрия установки, координаты частиц )
- **Rho** ( координаты частиц )
- **FFT** ( функция плотности заряда или потенциал )
- **PoissonSolver** ( Фурье коэффициенты )
- **E\_SC** ( потенциал электрического поля )



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

## \_\_global\_\_ void Track ( )

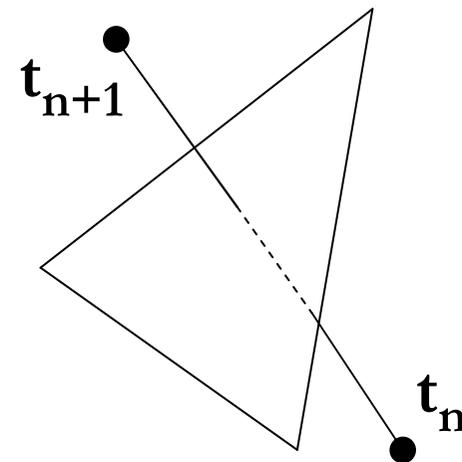
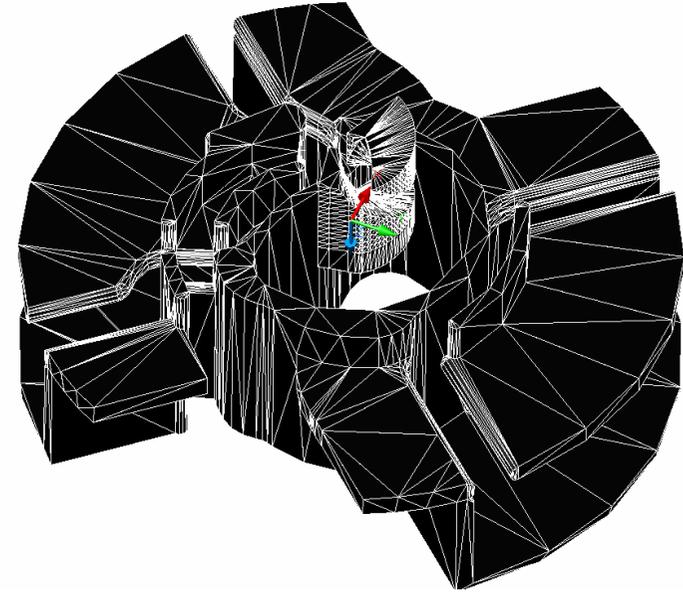
- Много входных параметров. Использование типа переменной `__constant__` для неизменных параметров:
  - `__device__ __constant__ float d_float[200];`
  - `__device__ __constant__ int d_int[80];`
- Каждой частице соответствует нить:
  - `int n = threadIdx.x+blockIdx.x*blockDim.x;`
- Количество “`if, goto, for`” необходимо максимально сократить



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING CENTER

## \_\_global\_\_ void Losses ()

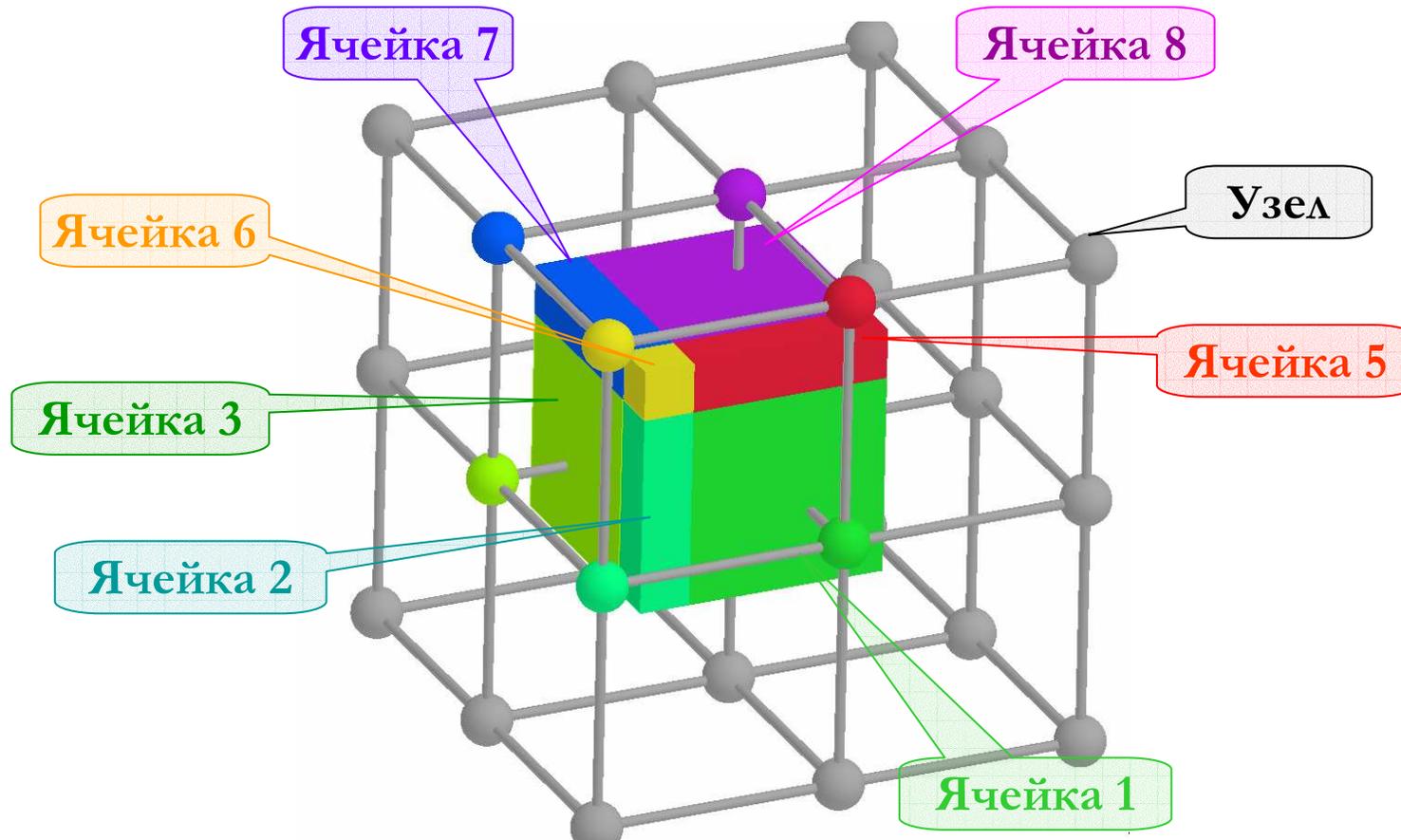
- Геометрическая структура состоит из треугольников. Для хранения координат вершин используется \_\_shared\_\_ переменные. Такой подход существенно ускоряет процесс.
- Каждой частице соответствует номер нити:
  - `int n = threadIdx.x+blockIdx.x*blockDim.x;`
  - Проверка условия пересечения частицей плоскости треугольника





## \_\_global\_\_ void Rho

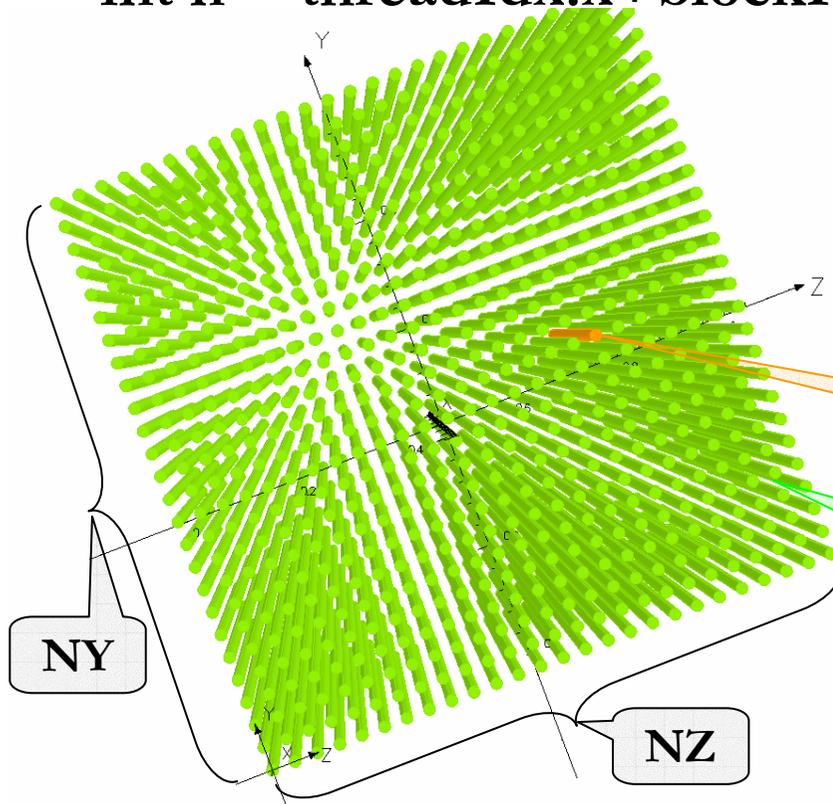
- Алгоритм раздачи заряда в узлы сетки от каждой частицы с номером  $\text{int } n = \text{threadIdx.x} + \text{blockIdx.x} * \text{blockDim.x}$ ;





## \_\_global\_\_ FFT ( )

- Действительное БПФ по базисным функциям  $\sin(\pi n/N)$ ;
- 3D преобразование состоит из трех последовательных 1D БПФ по осям: X, Y, Z соответственно
- `int n = threadIdx.x+blockIdx.x*blockDim.x;`



```
k=(int)(n/(NY+1));
```

```
j=n-k*(NY+1);
```

```
m=j*(NX+1)+k*(NX+1)*(NY+1);
```

```
FFT_X[i+1]=Rho[i+m];
```

```
n = j + k*(NY+1)
```

Массив данных для  
функции Rho трех  
переменных



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

## \_\_global\_\_ PoissonSolver ( )

- Номер нити

```
int n = threadIdx.x+blockIdx.x*blockDim.x;
```

- Каждая нить находит значение потенциала

$$U_{\text{ind}(i,j,k)} = U_{\text{ind}(i,j,k)} / (kx_i^2 + ky_j^2 + kz_k^2)$$

В узле с номером:

$$\text{ind}(i,j,k) = i + j * (\text{NX} + 1) + k * (\text{NX} + 1) * (\text{NY} + 1),$$

где

$$k = (\text{int})(n / ((\text{NX} + 1) * (\text{NY} + 1)));$$

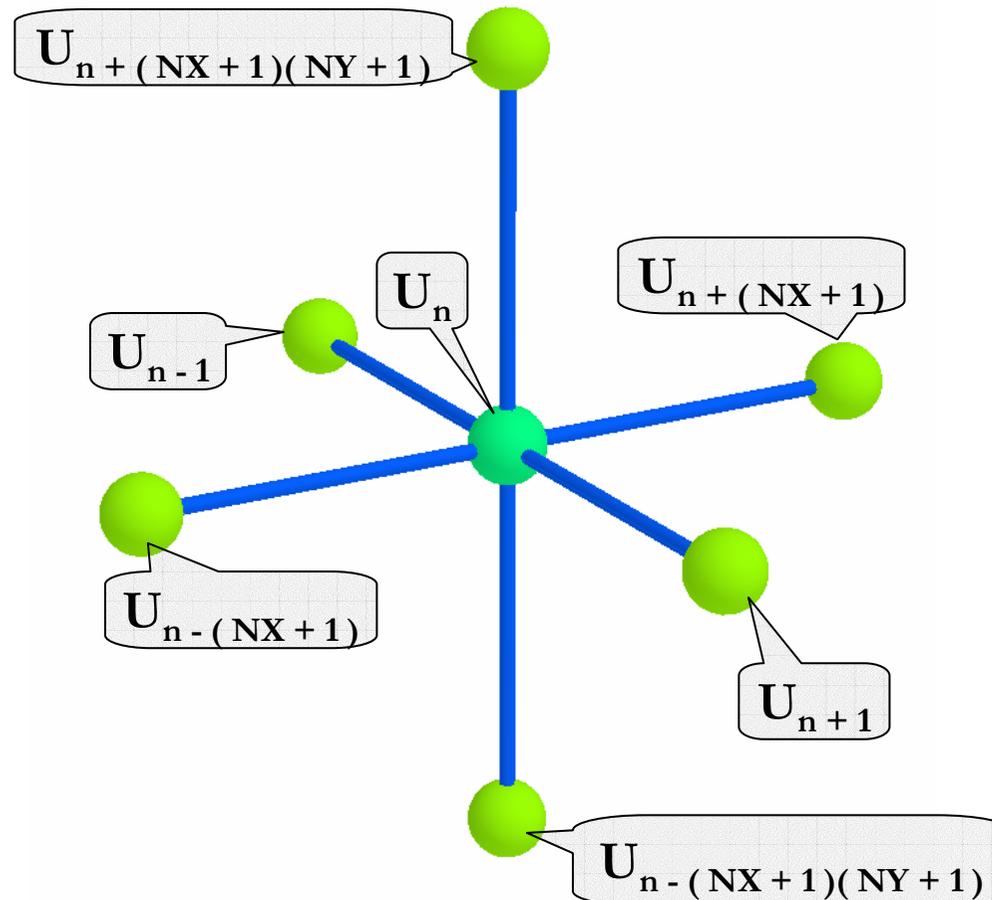
$$j = (\text{int})(n - k * (\text{NX} + 1) * (\text{NY} + 1)) / (\text{NX} + 1);$$

$$i = n - j * (\text{NX} + 1) - k * (\text{NX} + 1) * (\text{NY} + 1);$$



## \_\_global\_\_ E\_SC ( )

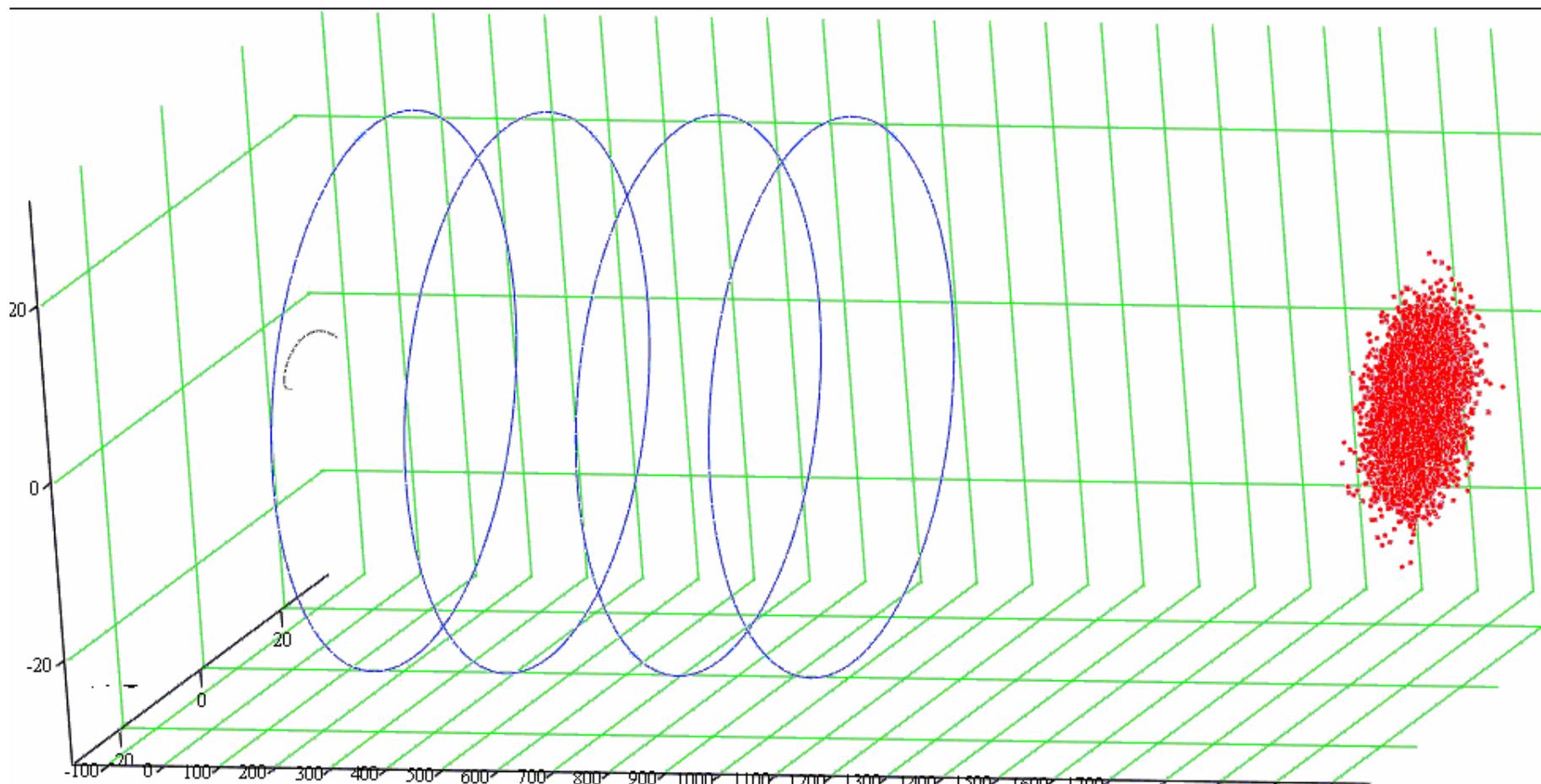
- Вычисление электрического поля в узле с номером  
`int n = threadIdx.x+blockIdx.x*blockDim.x+st_ind`





НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

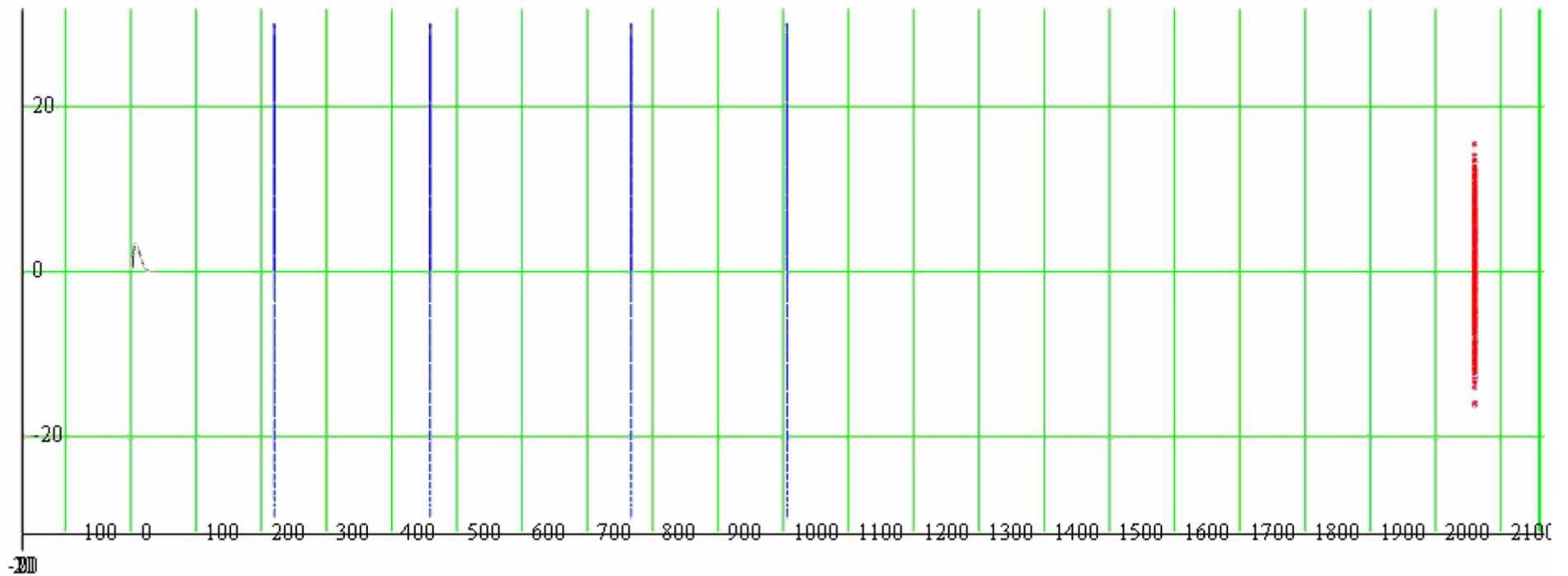
# Аксиальная инжекция пучка





НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

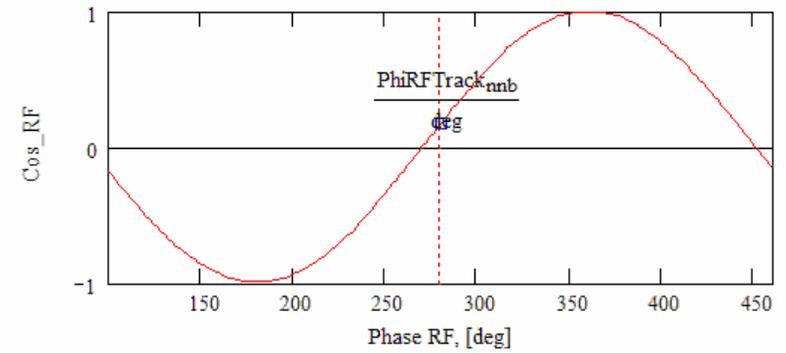
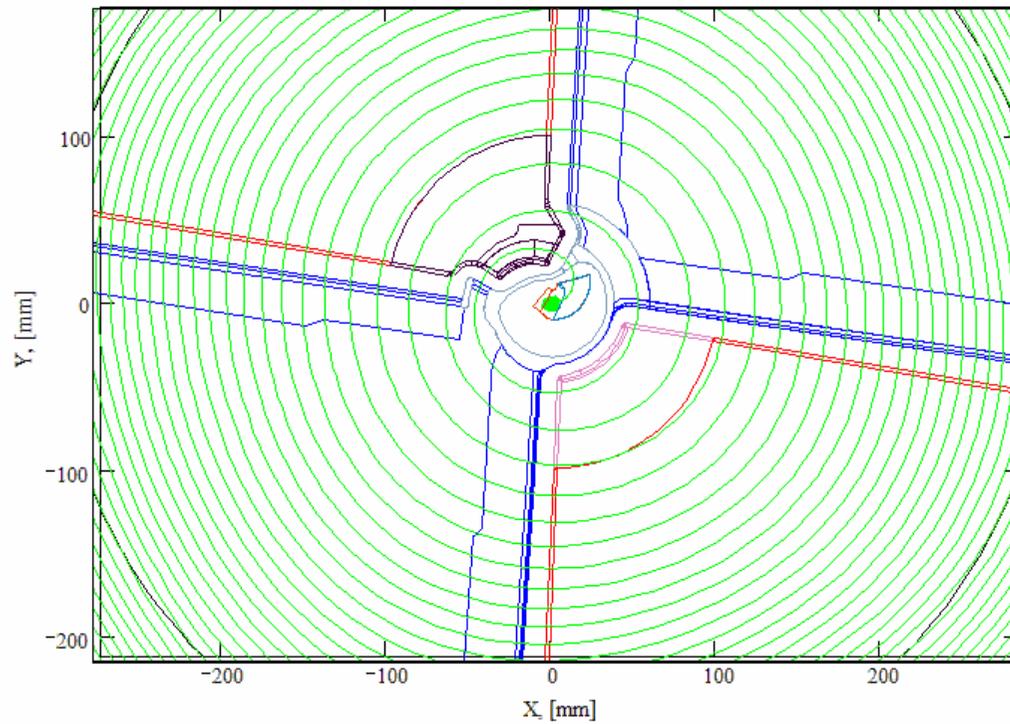
# Процесс банчировки пучка





НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER

# Ускорение в циклотроне



$$\text{PhiRF}_{\text{nm}} = -79.7 \text{ deg}$$

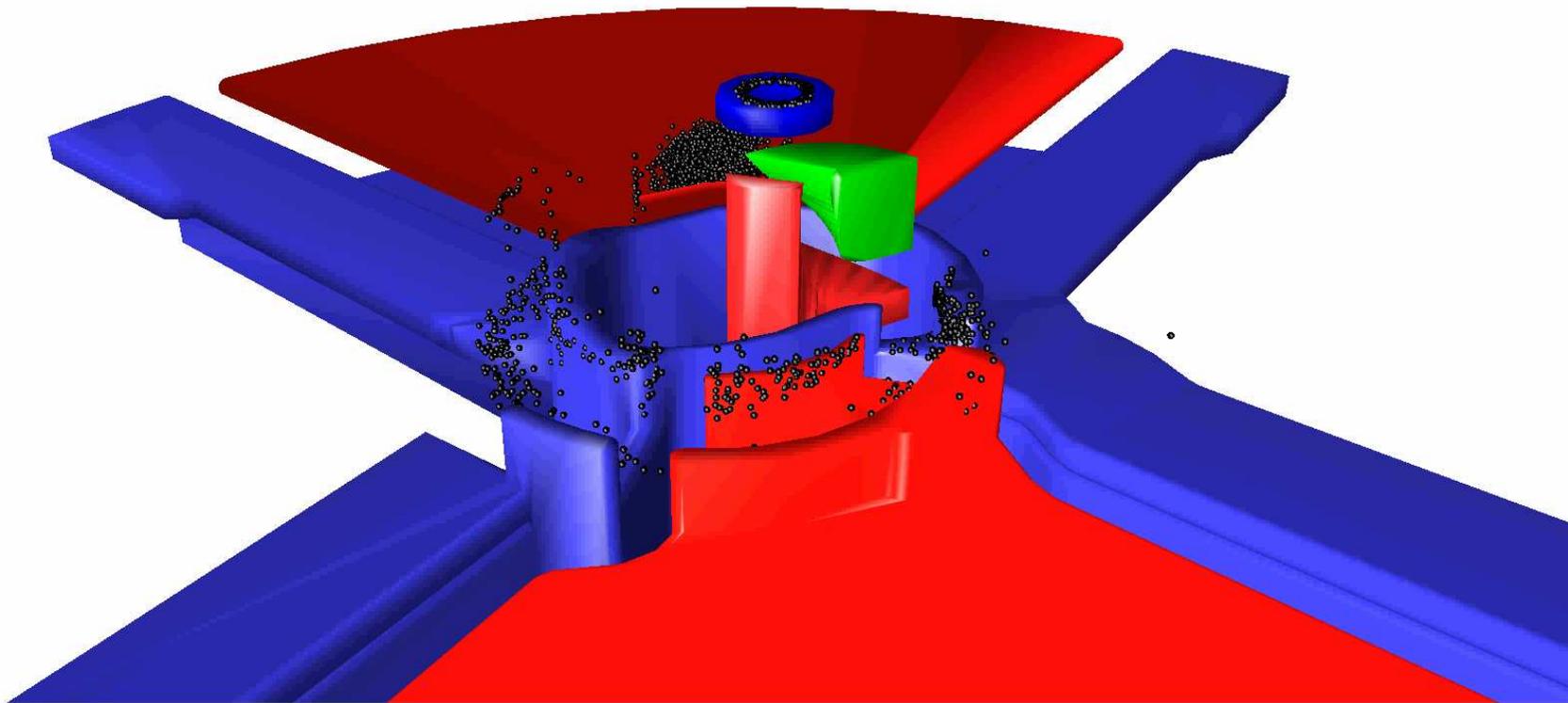
$$\text{Energy}_{\text{nm}} = 45 \text{ keV}$$



# Анимация

НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

Program\_version1

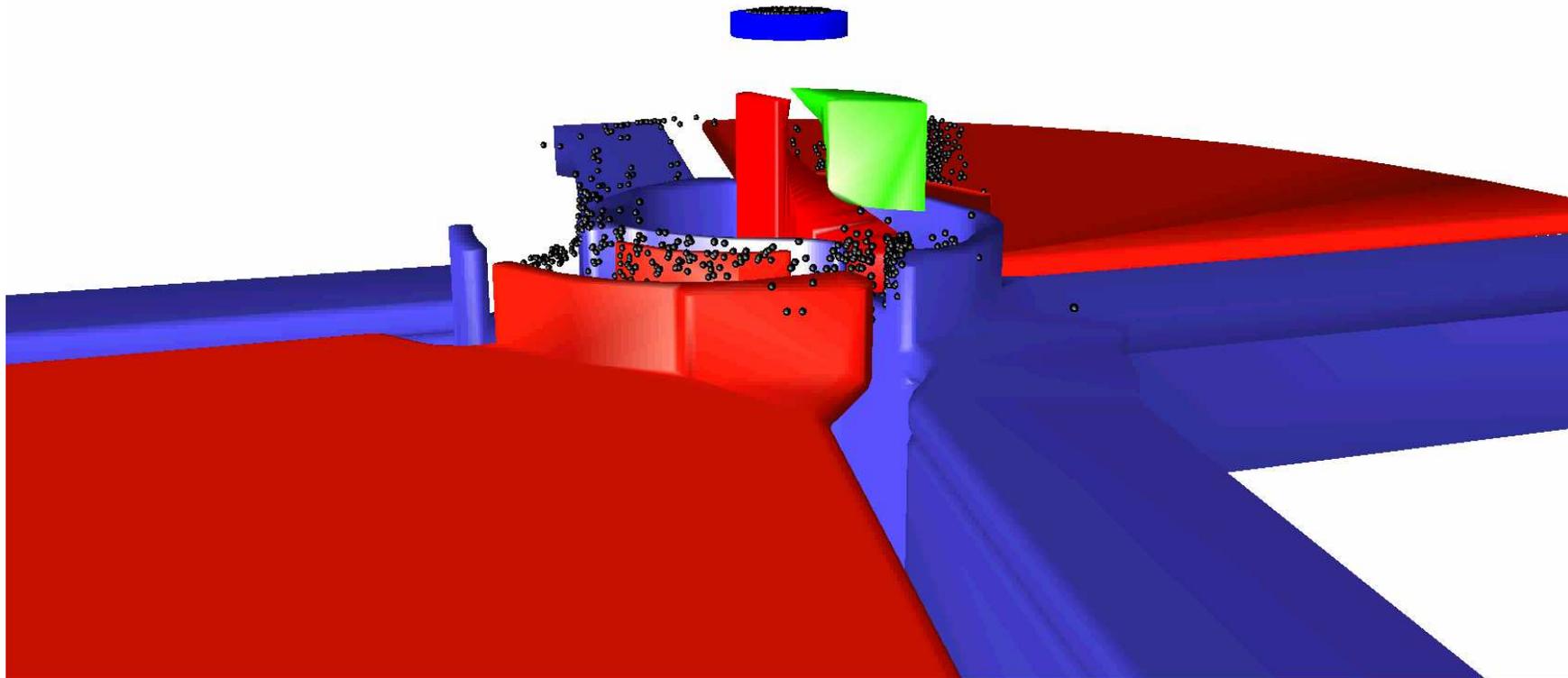




# Анимация

НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER

Program\_version1

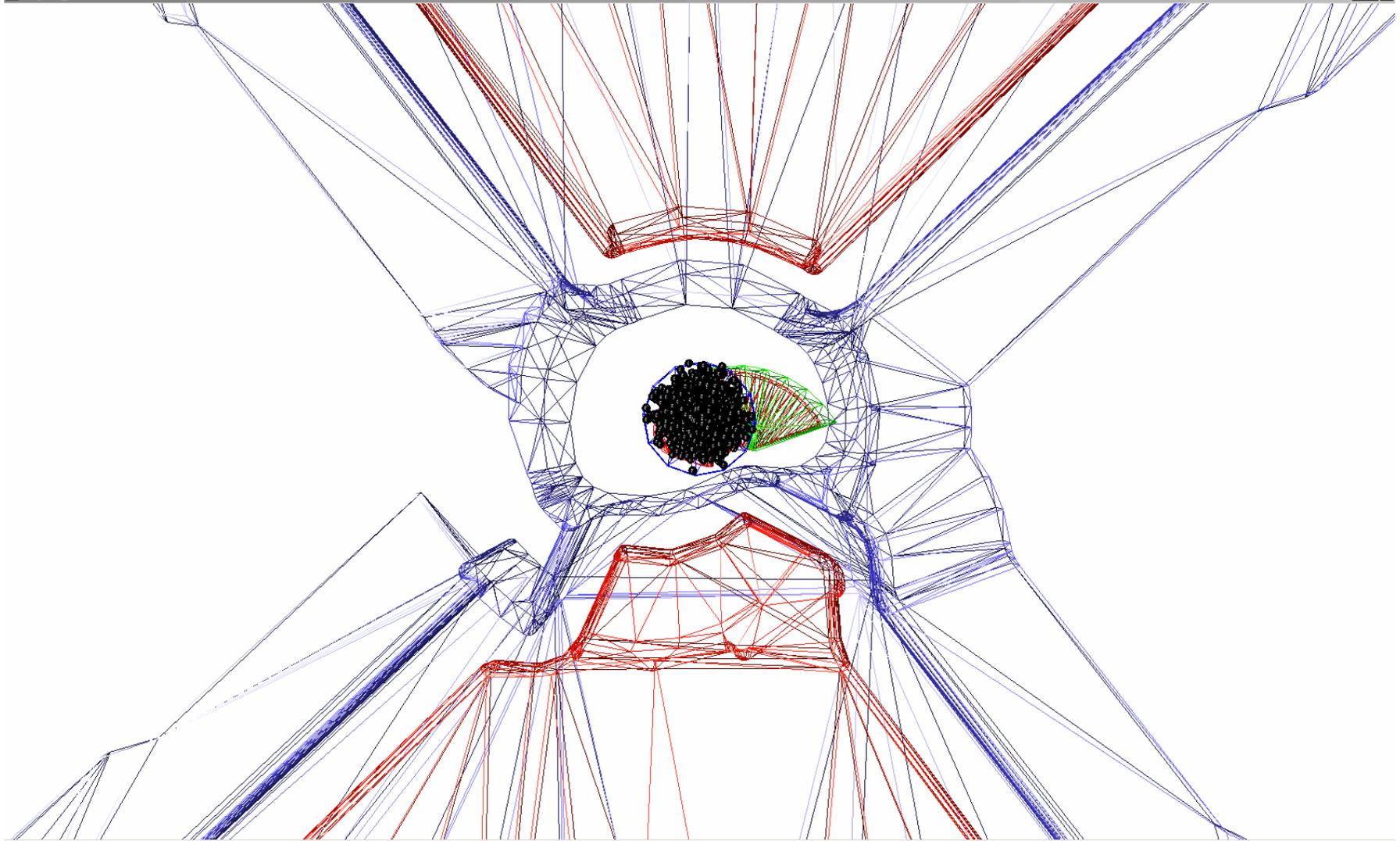




# Анимация

НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

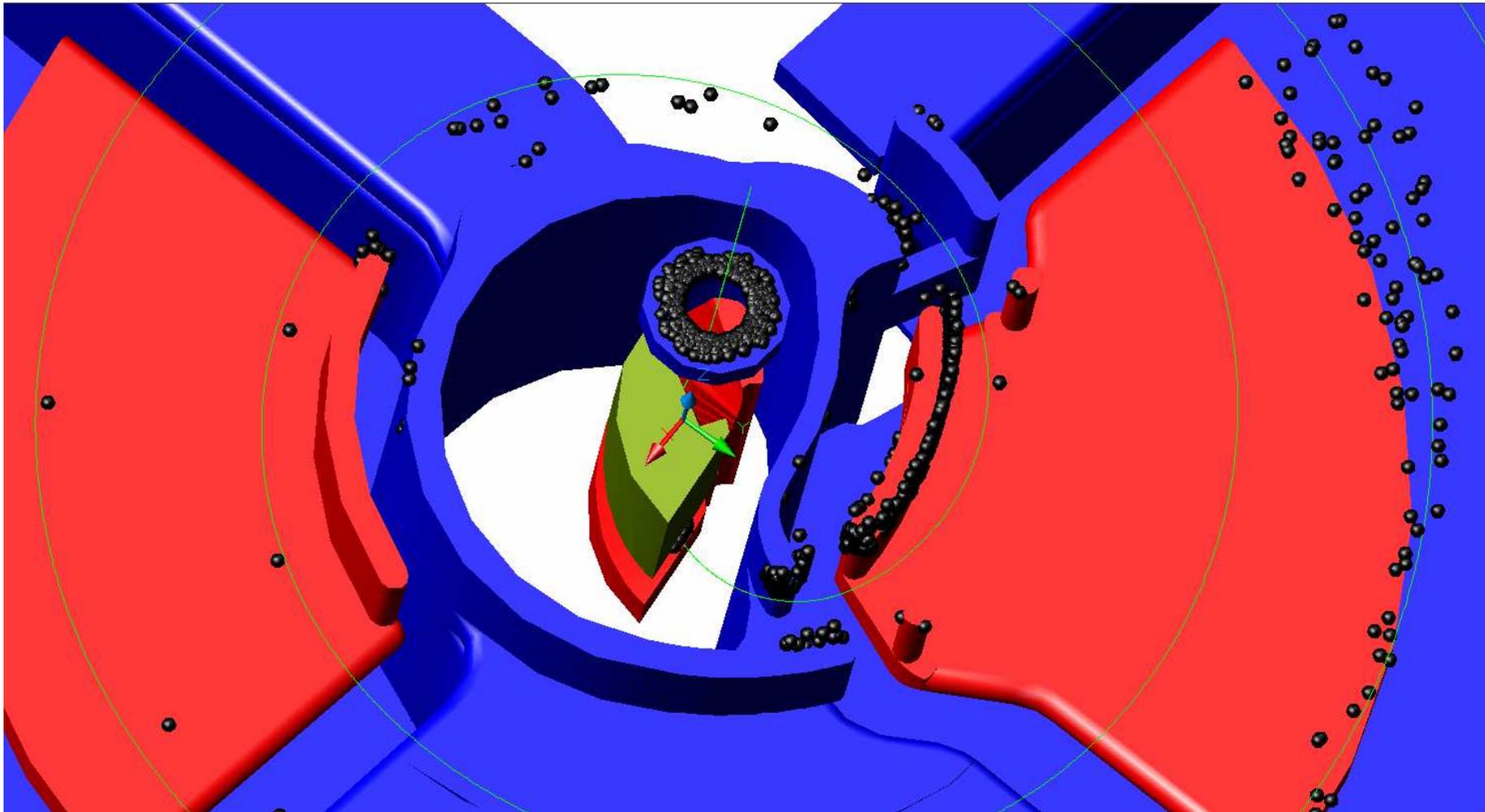
Program\_version1





# Потери частиц

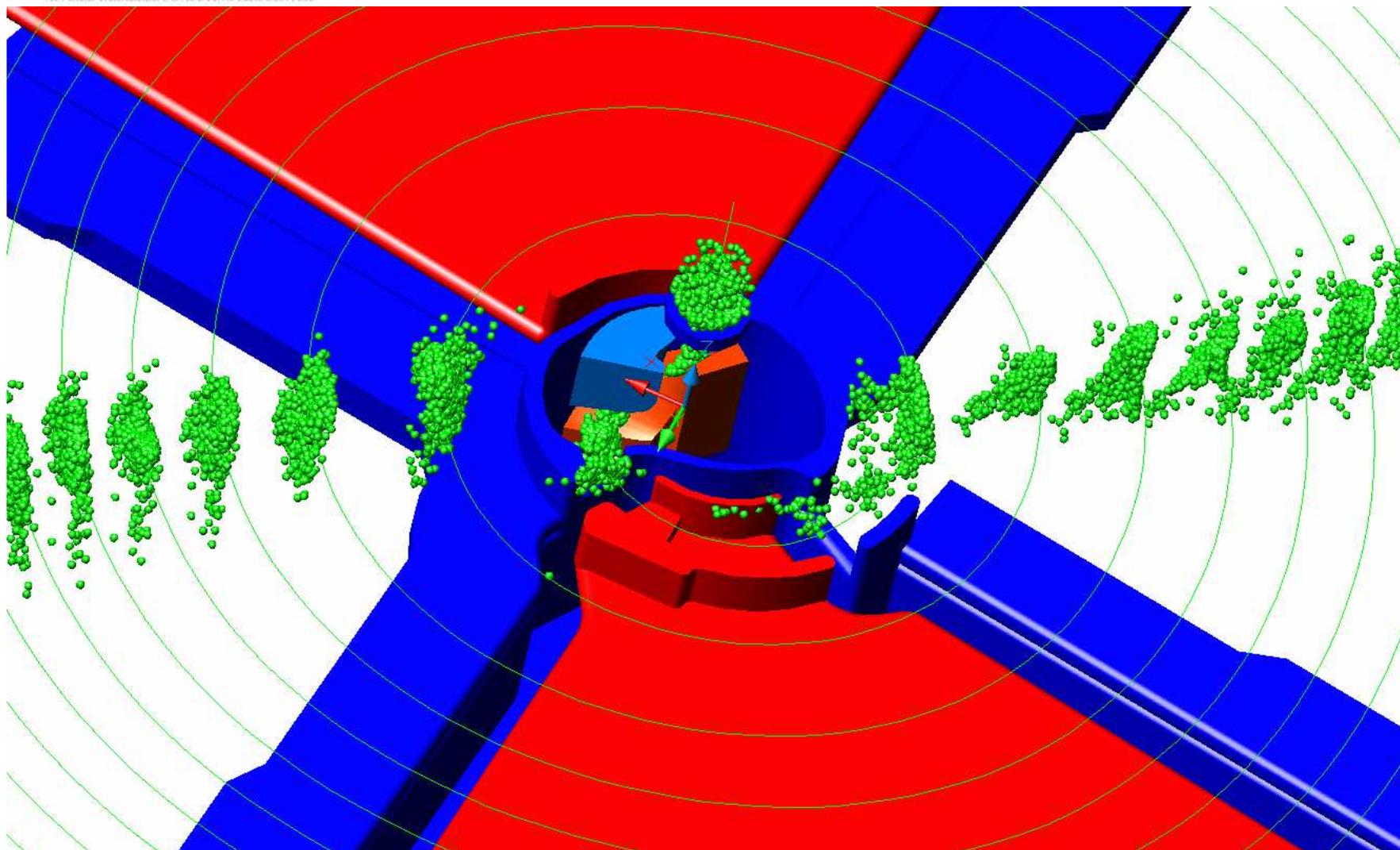
НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER





# Ускорение банчей

НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER





НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

# GeForce 8800GTX

Функции*	Время, [мс]		Ускорение, [раз]
	CPU**	GPU	
Track	486	30	16
Losses	6997	75	93
Rho	79	6	14
Poisson/FFT	35	3	13
E_SC	1.2	0.8	1.4
Total	7598	114	67

\*Размер сетки:  $2^5 \times 2^5 \times 2^5$ . Число частиц: 100,000 треугольников: 2054

\*\*CPU с частотой 2.4 ГГц



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER

## Сравнение CPU и GeForce 8800GTX

Число частиц	Время вычислений		Ускорение, [раз]
	CPU*	GPU	
1,000	3 мин. 19 с.	12 с.	17
10,000	34 мин. 14 с.	42 с.	49
100,000	5 ч. 41 мин.	6 мин.	56
1,000,000	2 дня 8 ч. 53 мин.	1 ч.	60

\*CPU с частотой 2.4 ГГц



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER

## Сравнение CPU с Tesla C1060

Число частиц	Время вычислений		Ускорение, [раз]
	CPU 2.5ГГц	GPU C 1060	
1,000	3 мин. 12 с.	11 с.	18
10,000	32 мин. 24 с.	27 с.	72
100,000	5 ч. 14 мин. 31 с.	3 мин. 34 с.	88
1,000,000	2 дня 4 ч. 25 мин.	34 мин. 29 с.	91

**БЕЗ пространственного заряда**



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

# Сравнение CPU с Tesla C1060

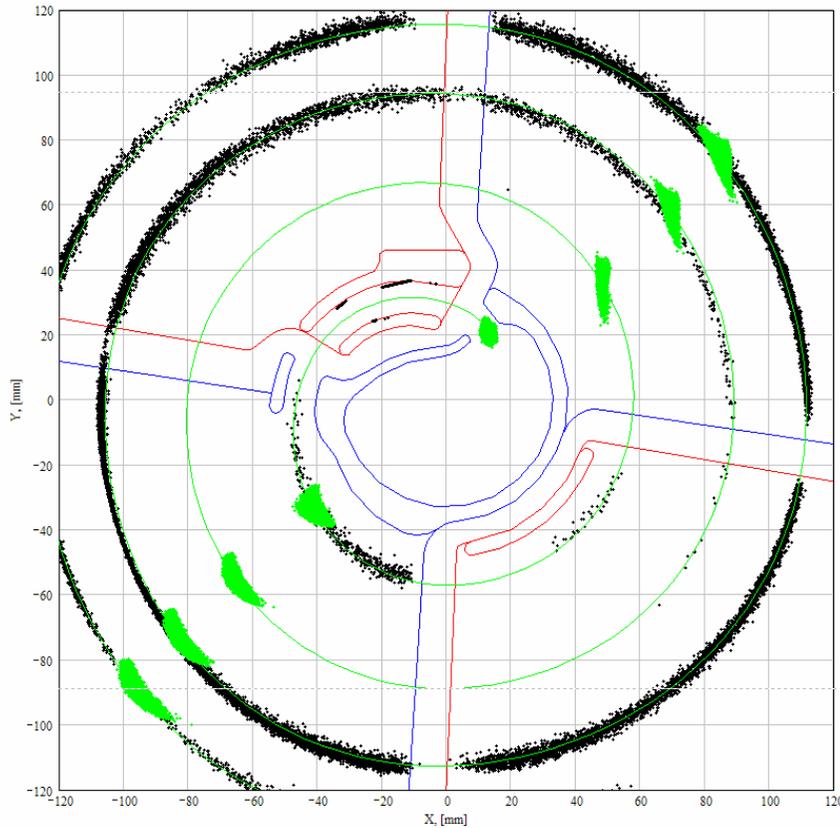
Число частиц	Время вычислений		Ускорение, [раз]
	CPU 2.5 ГГц	GPU C 1060	
10,000	33 мин. 36 с.	44 с.	45
100,000	5 ч. 28 мин. 12 с.	5 мин. 4 с.	65
1,000,000	2 дня 8 ч. 27 мин.	50 мин. 17 с.	67

С пространственным зарядом

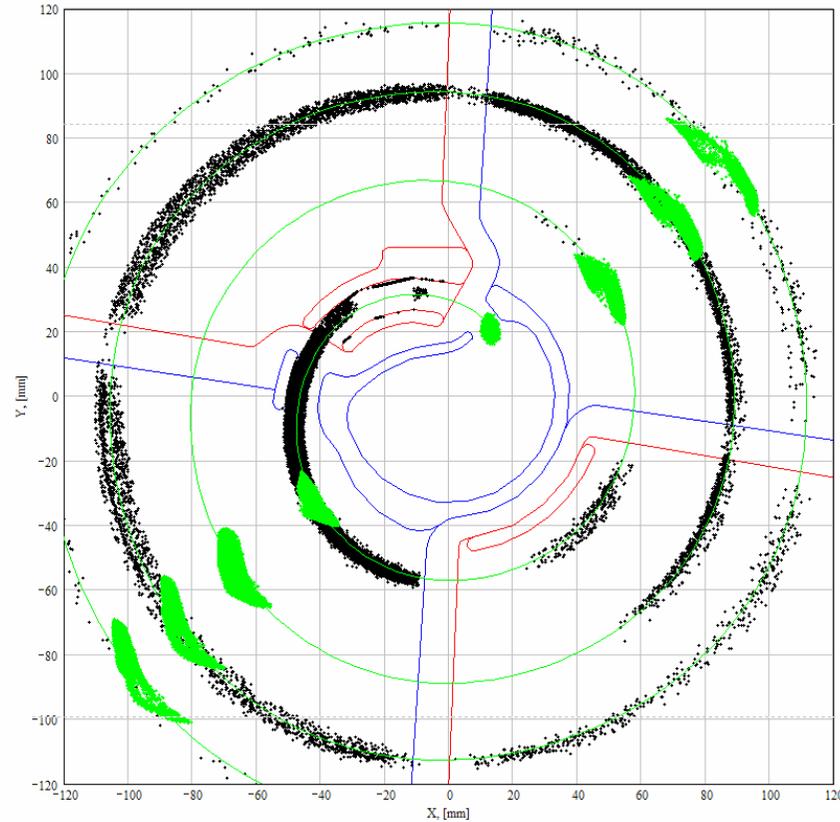


НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER

# Эффект пространственного заряда



$I \sim 0$   
Потери 24%



$I = 4 \text{ mA}$   
Потери 94%



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

## Заключение

- **Очень дешевая технология в сравнении с CPU;**
- **Увеличение производительности на 1.5 – 2 порядка дает шанс проведения моделирования ресурсоемких физических моделей;**
- **Требует аккуратного программирования.**



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

# Клеточный автомат



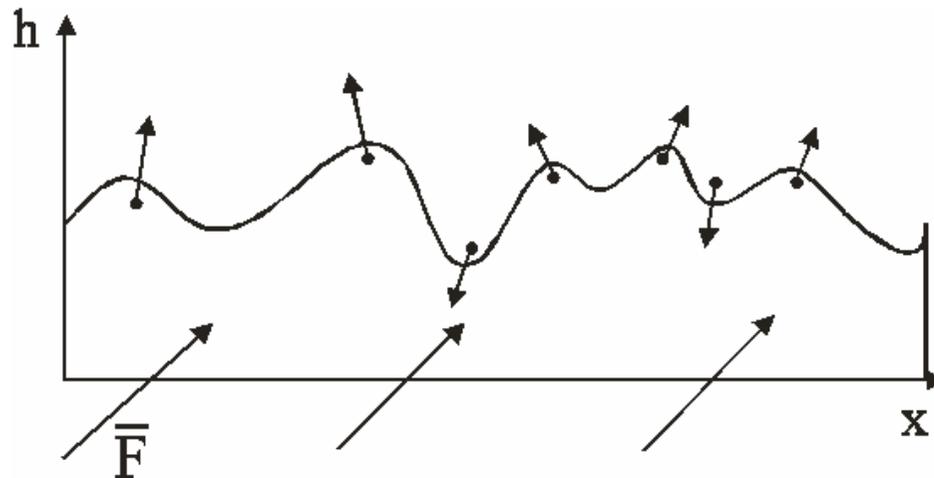
НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING CENTER

## Растущие поверхности и гипотеза универсальности

Уравнение Кардара-Паризи-Жанга:

$$\partial_t h = \nu \Delta h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(x, t)$$

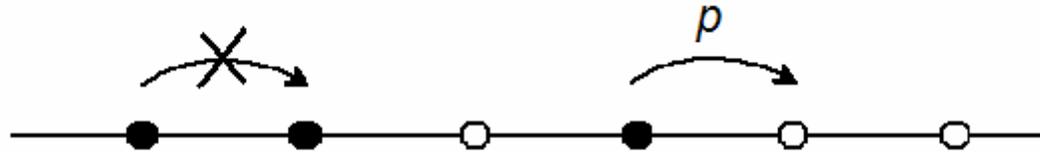
$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = D \delta(x - x') \delta(t - t')$$





НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

## Полностью асимметричный Exclusion Process



Если следующий узел справа свободен, частица либо прыгает в него с вероятностью  $p$ , либо остается в данном узле с вероятностью  $(1-p)$ . Если следующий узел справа занят, частица стоит с вероятностью 1.

### Обратный последовательный апдейт:

Частицы принимают решение и соответственно меняют (или не меняют) положение, последовательно, начиная с последней.



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING & R CENTER

# Постановка задачи

Пусть  $Y_t$  общее число скачков частиц за время  $t$

$$y = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{Y_t - m \cdot p \cdot t}{\sqrt{t \cdot p(1-p)}}$$

Скейлинговая гипотеза:

$$m \rightarrow \infty$$

$$P_m(y) \sim m^{-\alpha} g\left(\frac{y - \langle y \rangle}{m^\alpha}\right)$$

$$\langle y^n \rangle_c \sim m^{\alpha n}, \quad n \geq 2$$

$$\alpha, \quad g(x) \quad - \quad ?$$



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING CENTER

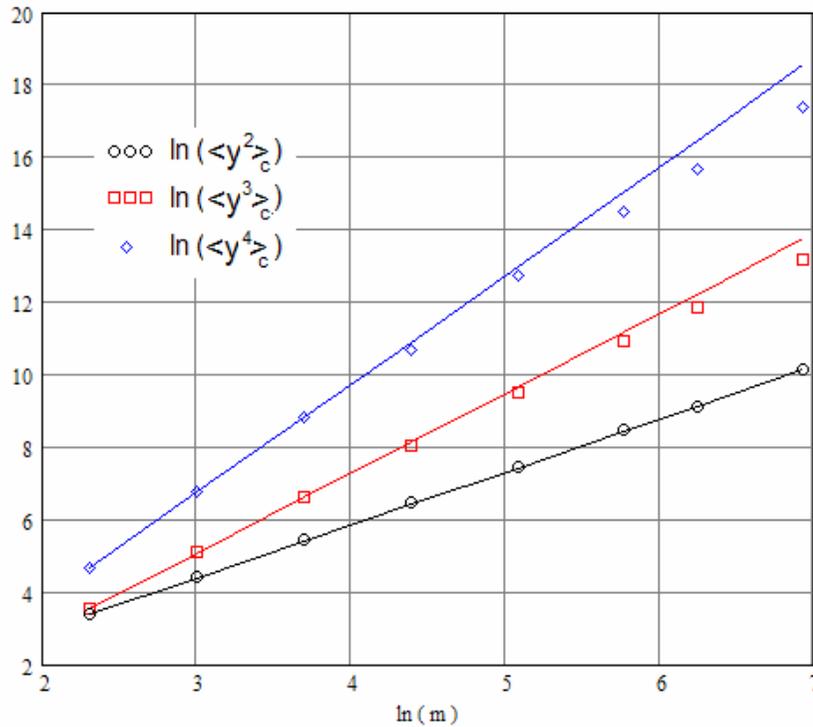
# Время вычислений

Статистика	Кол-во частиц	GPU	CPU
$10^6 \times 10^6$	10	~3ч. 53мин.	~8д. 6ч.
$10^6 \times 10^6$	20	~9ч.	~19д.
$10^6 \times 10^6$	40	~17ч. 54мин.	~38д. 6ч.
$10^6 \times 10^6$	80	~38ч.	~80д. 18ч.
$7 \cdot 10^5 \times 7 \cdot 10^5$	160	~39ч. 25мин.	~83д.
$6 \cdot 10^5 \times 6 \cdot 10^5$	320	~67ч.	~142д. 9ч.
$5 \cdot 10^5 \times 5 \cdot 10^5$	512	~47ч. 13мин.	~100д.
$4 \cdot 10^5 \times 3 \cdot 10^5$	1024	~46ч. 21мин.	~98д.
$1.2 \cdot 10^6 \times 1.2 \cdot 10^6$	80	~ 55ч. 13д. 12 ч.	~117д. 687 д.



# Кумулянты

НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER



$$\alpha = \frac{\tan(\beta_n)}{n} = \frac{3}{4}, \quad n - \text{номер кумулянта}$$

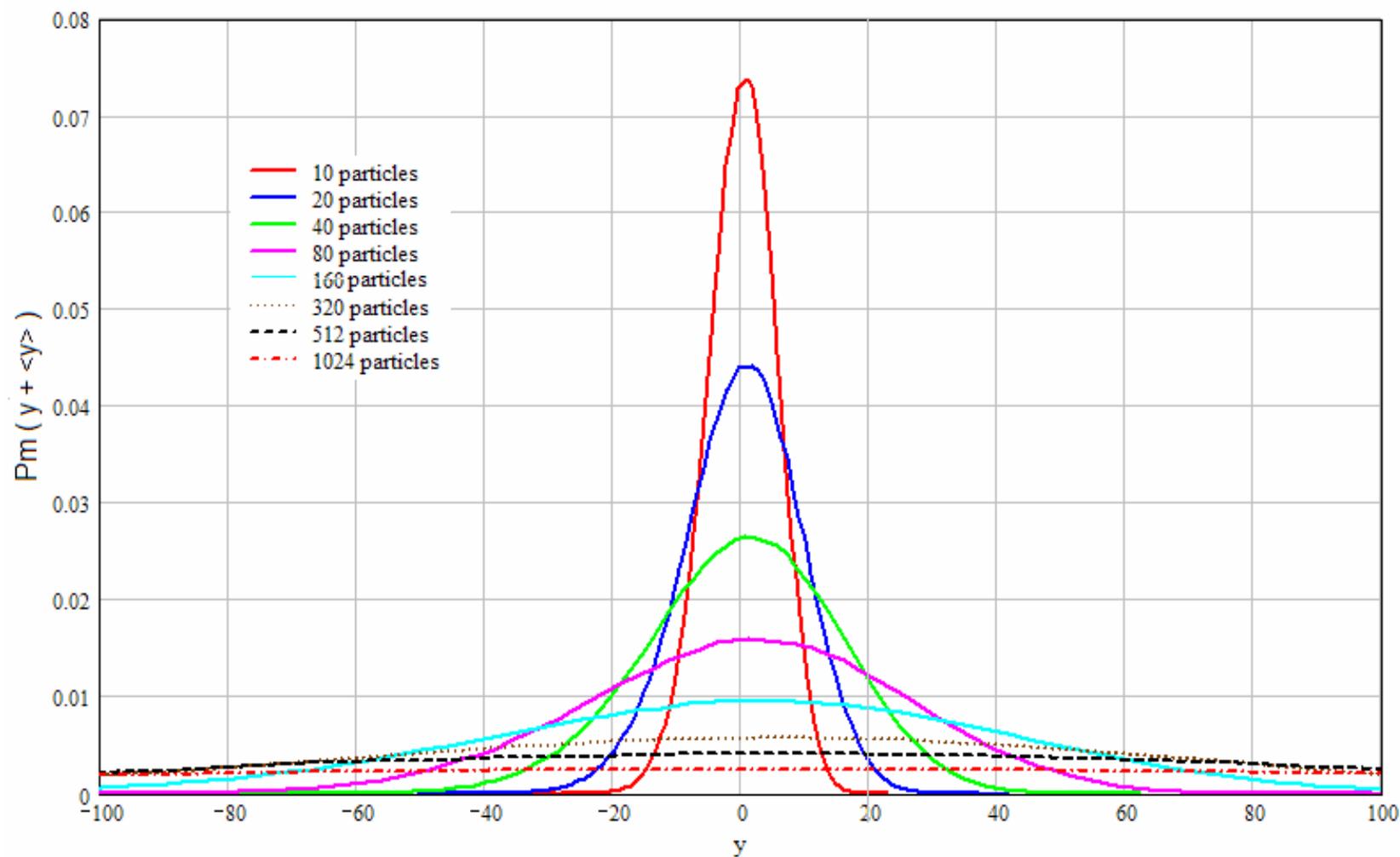
$$\langle y^2 \rangle_c \sim m^{3/2}, \quad \langle y^3 \rangle_c \sim m^{9/4}, \quad \langle y^4 \rangle_c \sim m^3$$

n	Гипотеза	Расчет
	$\alpha \cdot n$	$\alpha \cdot n$
2	1.5	1.46
3	2.25	2.21
4	3	2.99



# Функции распределения

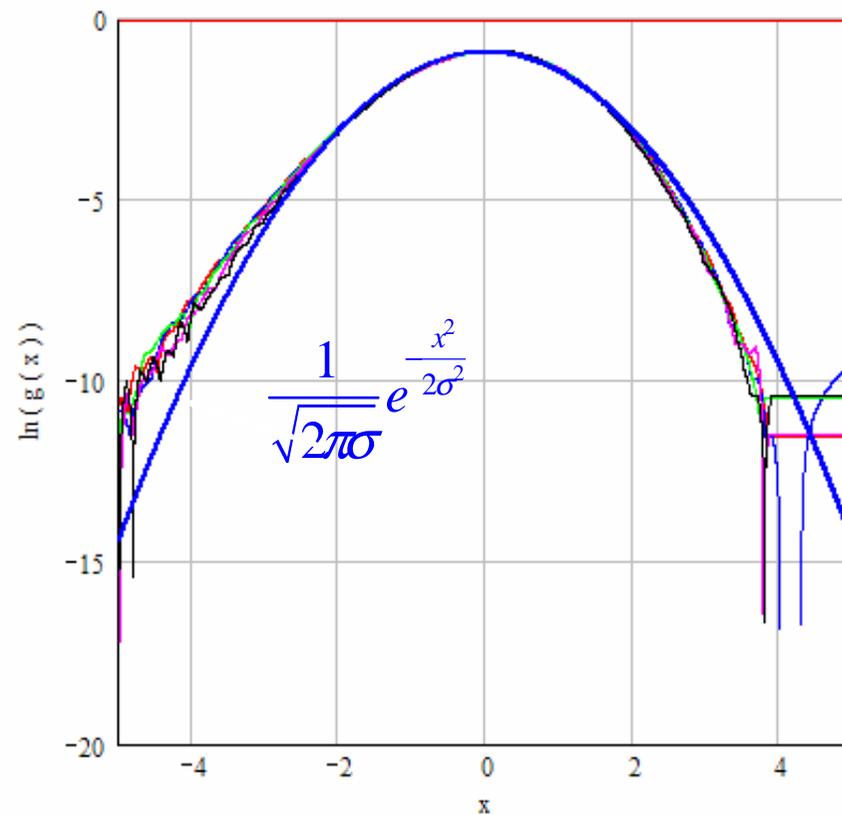
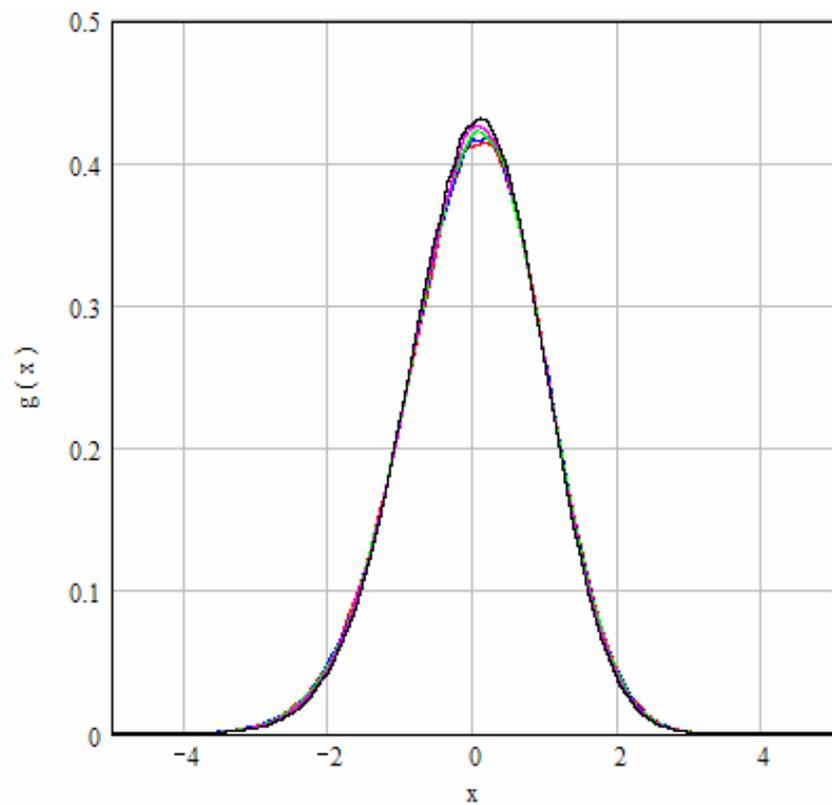
НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING CENTER





# Скейлинговые функции

НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER





НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

## Заключение

- Получено ускорение вычислений в 50 раз.
- В результате расчетов построена универсальная скейлинговая функция для моделей класса универсальности Кардара-Паризи-Жанга.



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

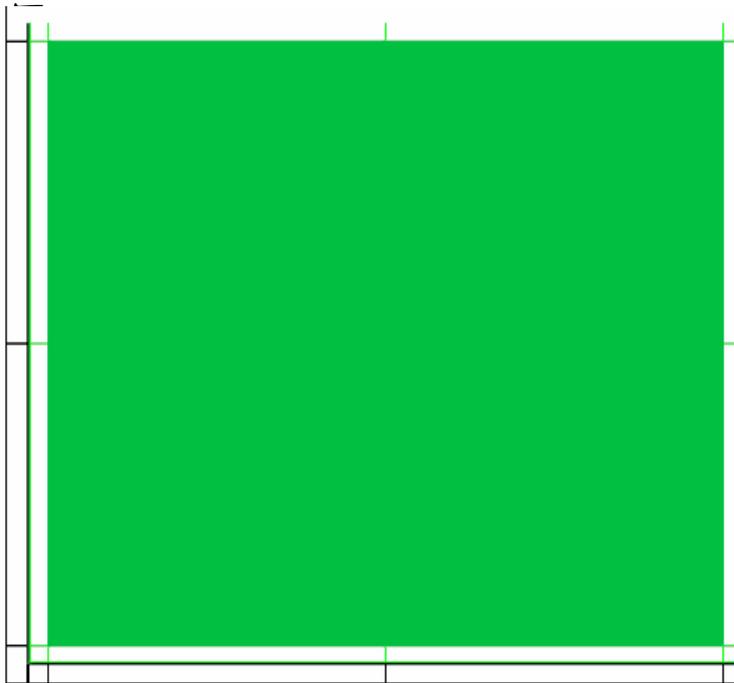
# Уравнение ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

---



НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING CENTER

# Распределение температуры

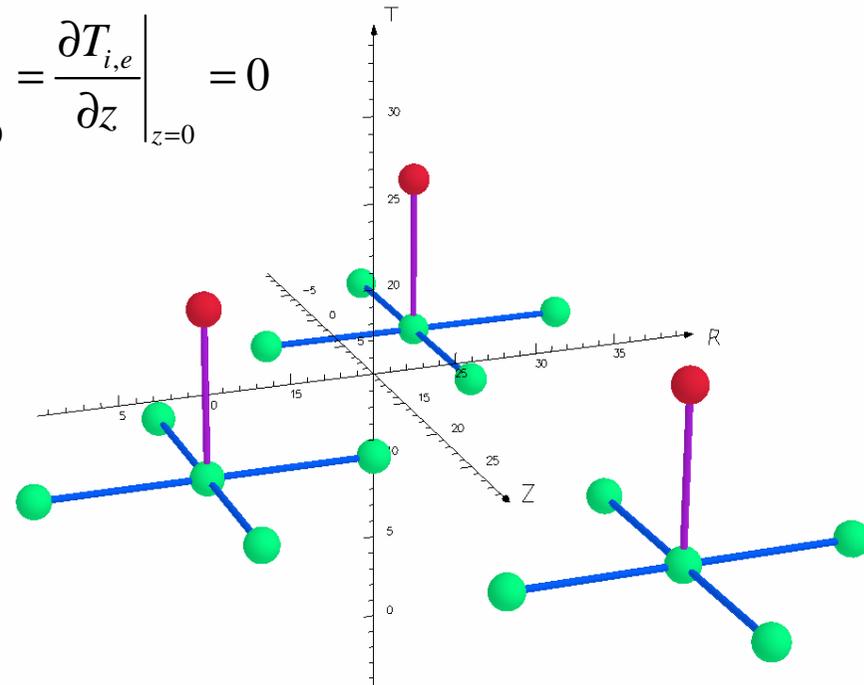


R

$$\begin{cases} \frac{\partial T_e}{\partial t} = k_e \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} \right\} - g_e (T_e - T_i) + A(r, z, t) \\ \frac{\partial T_i}{\partial t} = k_i \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial T_i}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial z^2} \right\} + g_i (T_e - T_i) \end{cases}$$

$$T_{i,e}(R_{\max}, z, t) = T_{i,e}(r, Z_{\max}, t) = T_{i,e}(r, z, 0) = 1$$

$$\left. \frac{\partial T_{i,e}}{\partial r} \right|_{r=0} = \left. \frac{\partial T_{i,e}}{\partial z} \right|_{z=0} = 0$$





НОЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ"  
APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

# Производительность

Mesh NR x NZ NT = 10000	CPU 2.5 GHz [sec]	GPU [sec]		GPU, Texture [sec]		Rate, [x]	
		float	double	float	double	float	double
	500 x 500	117	4	6	3	7	39
1000 x 1000	472	12	20	7	22	67	24
2000 x 2000	1885	49	81	28	88	67	23