

# 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  $10^5 \text{ см}^3$

Particle in Cell

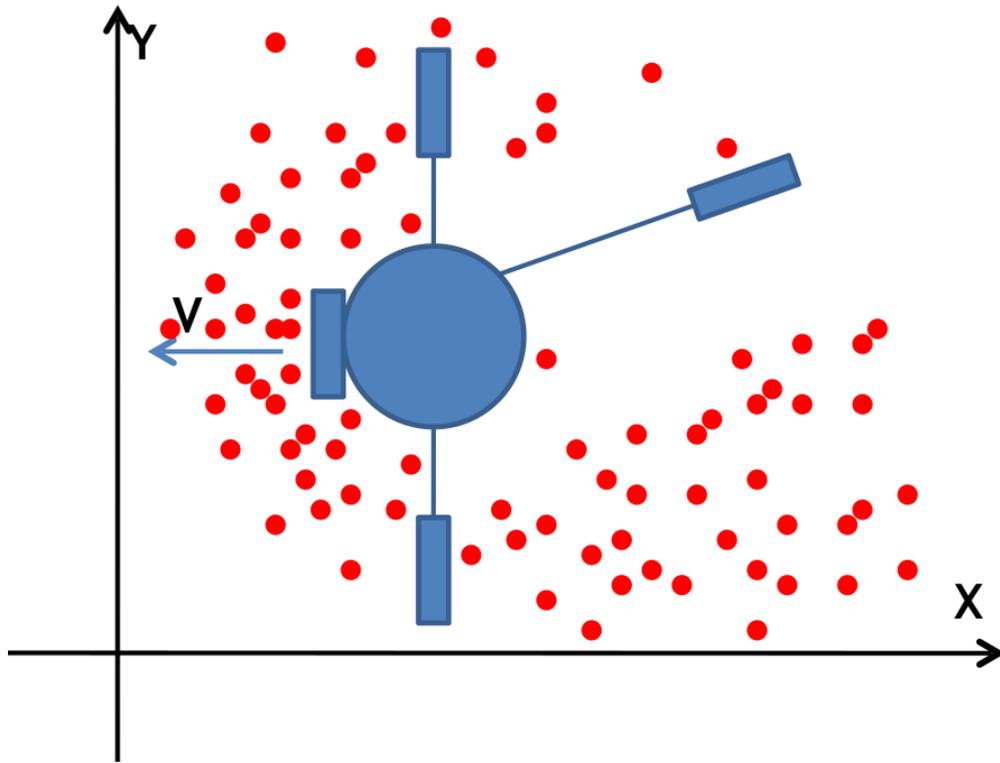
- Моделирование при концентрации частиц от  $10^3 \text{ см}^3$

В высоких слоях ионосферы наблюдаются концентрации от 1 до  $10^3 \text{ см}^3$

Предлагаемый подход

- молекулярная динамика

# Постановка задачи



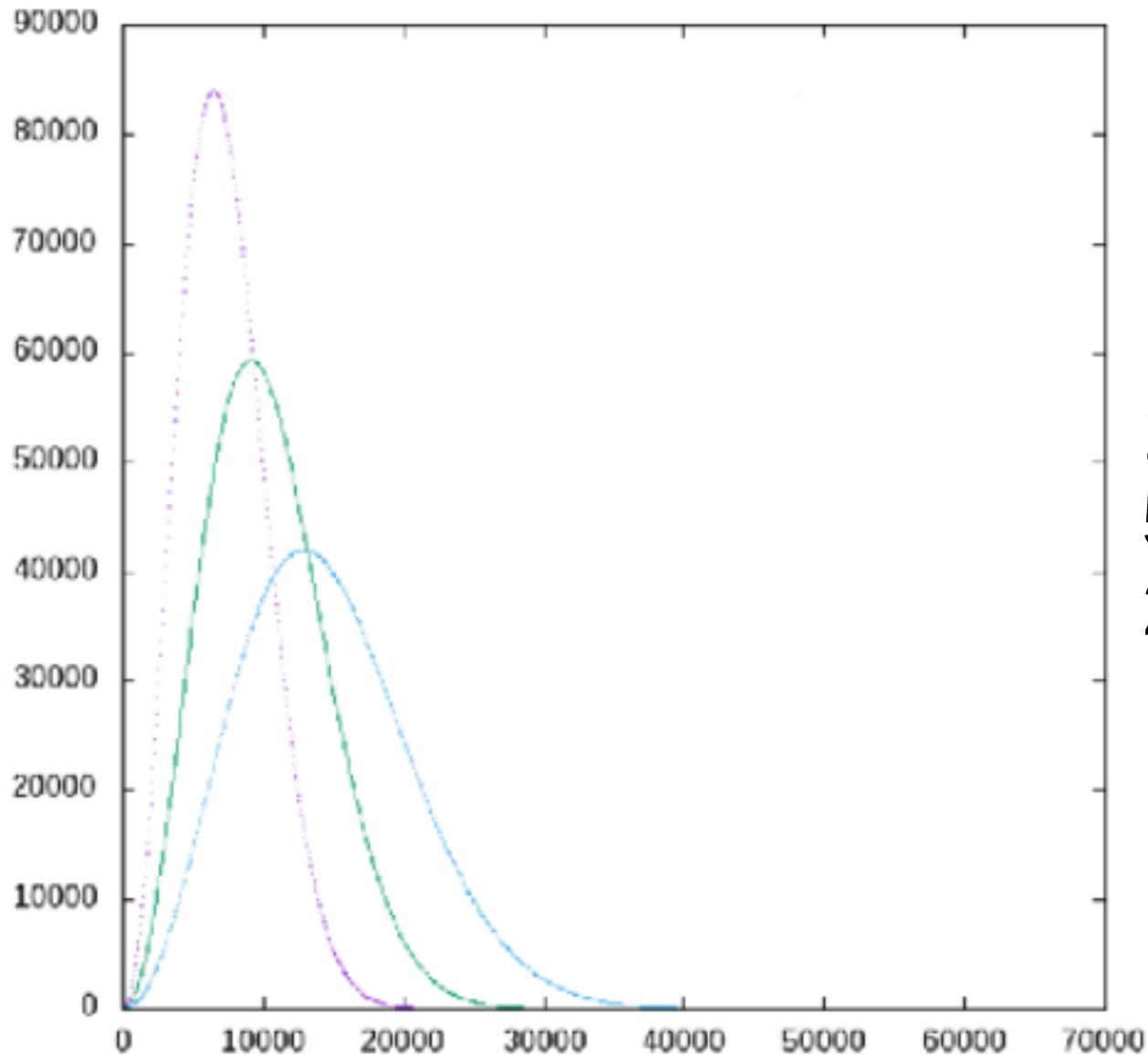
Спутник(сфера радиусом 0.2 м) движется в ионосфере земли, вдоль оси X со скоростью  $V=(от\ 8-\ до\ 20)\text{ км/с}$ . Окружающее пространство состоит из двухкомпонентной плазмы: ионов  $H^+$  или  $O^+$ , и электронов.

Температура плазмы: 3500-5000К.

Потенциал спутника: 1.8-5 В

Размер моделируемой области:  $2\text{ M}^3$

# 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

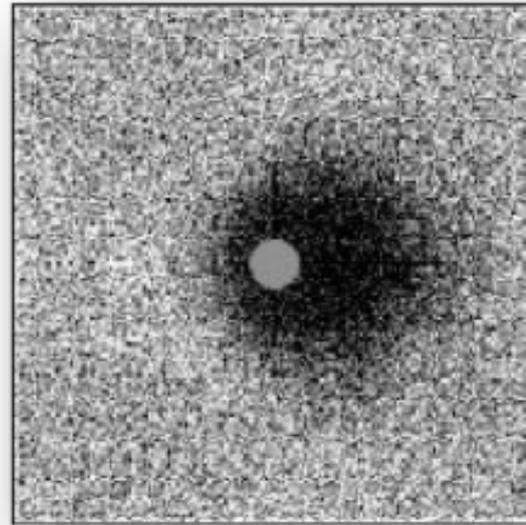
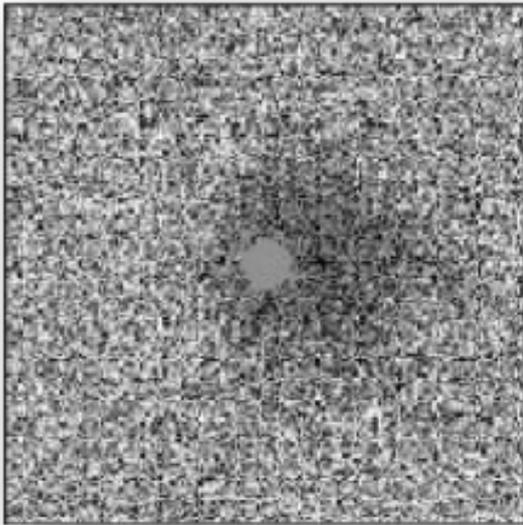
E – вектор напряжённости электрического поля

H – вектор напряжённости магнитного поля

n - количество частиц

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

# Влияние концентрации на ионную тень(2D)



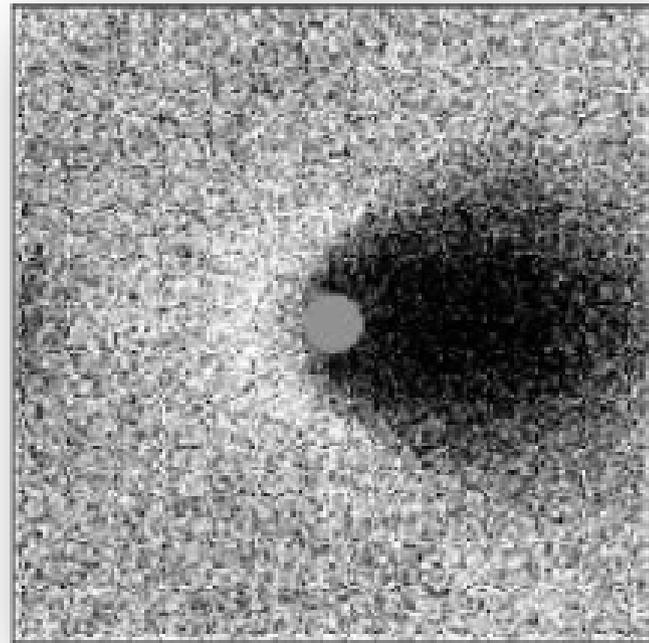
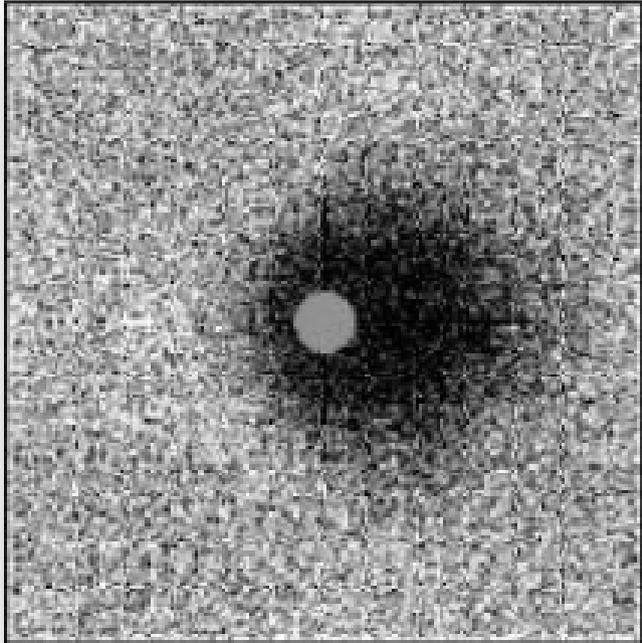
Ионы водорода и электроны.

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)

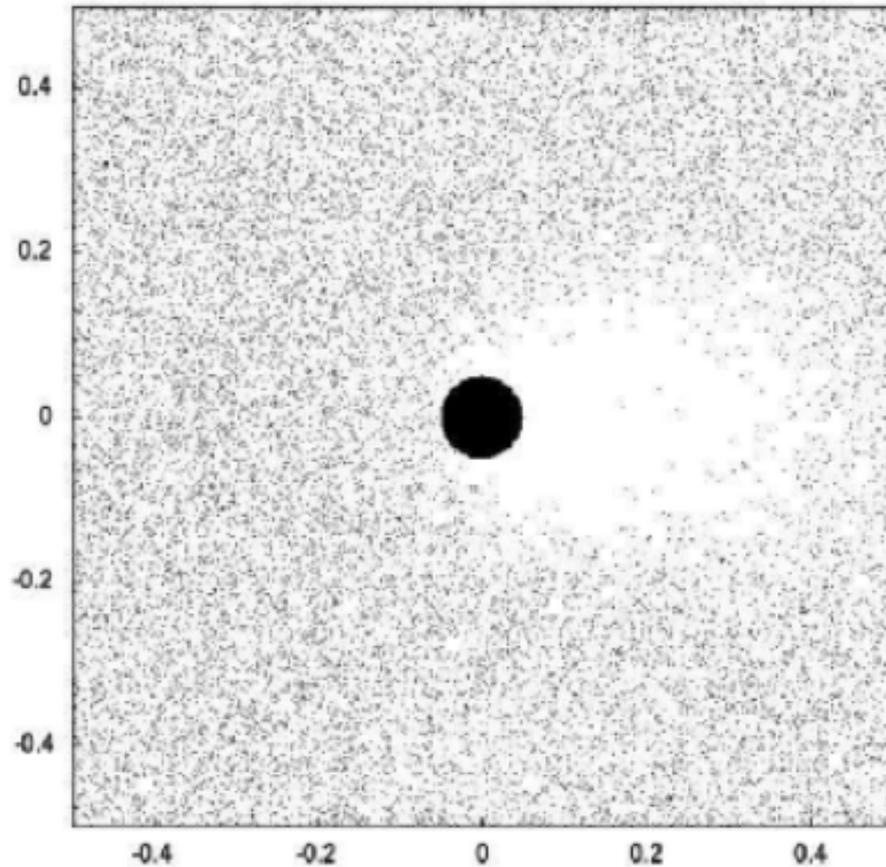


Слева скорость спутника 8 км/с, справа 20 км/с. Концентрация 100 частиц в  $См^2$

# Образование ионной тени 3D

Ионы кислорода и электроны.

В центре спутник, чёрные точки - ионы кислорода



Концентрация частиц:  
10 частиц в  $\text{См}^3$

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

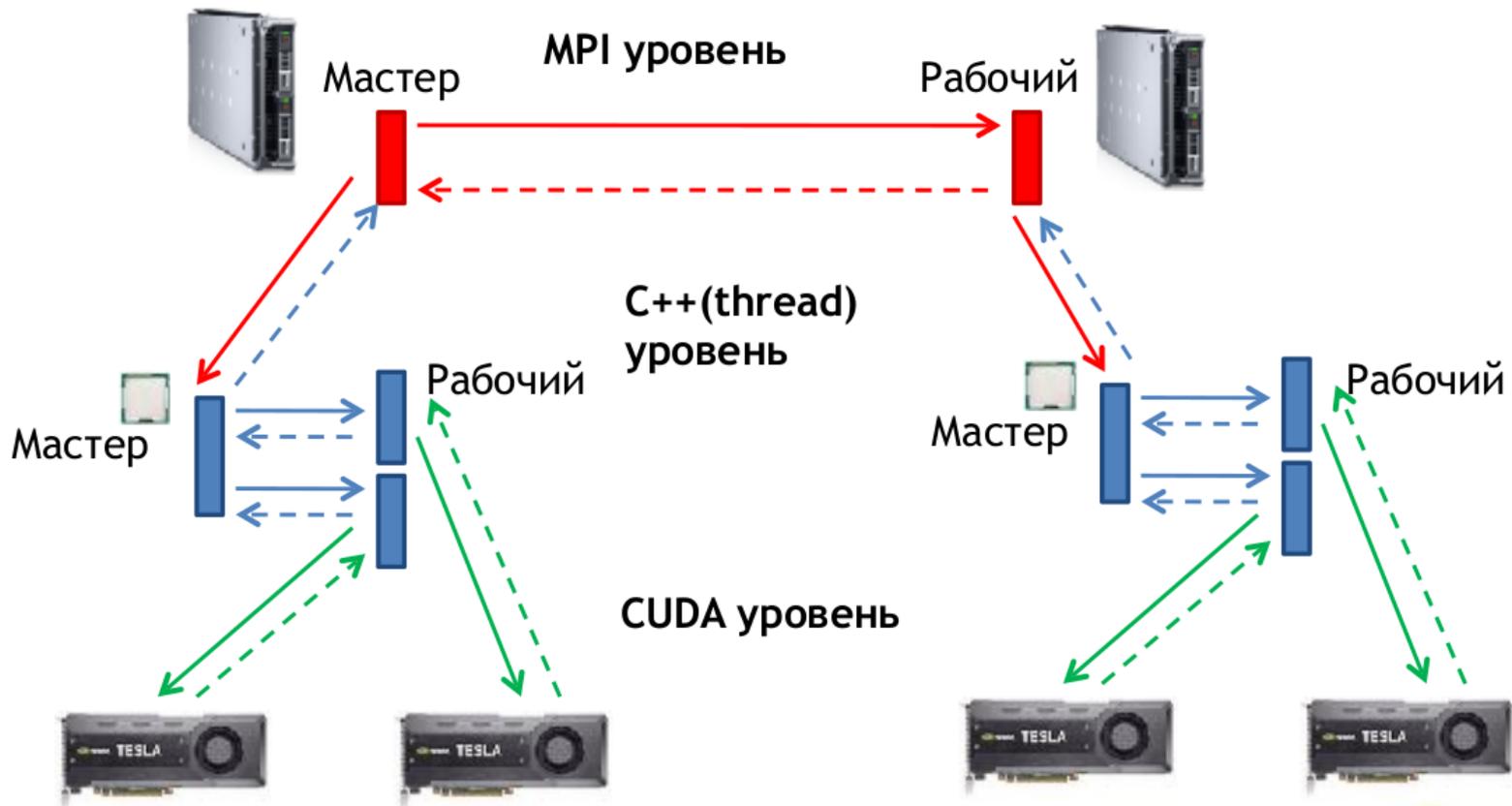
(Решение задачи представляет собой схему хранения двух полей: текущее и вычисляемое).

- Входное поле(или сегмент) дублируется в DRAM
  - Выходное поле (каждый элемент пишется один раз) храним в общей zero-copу 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



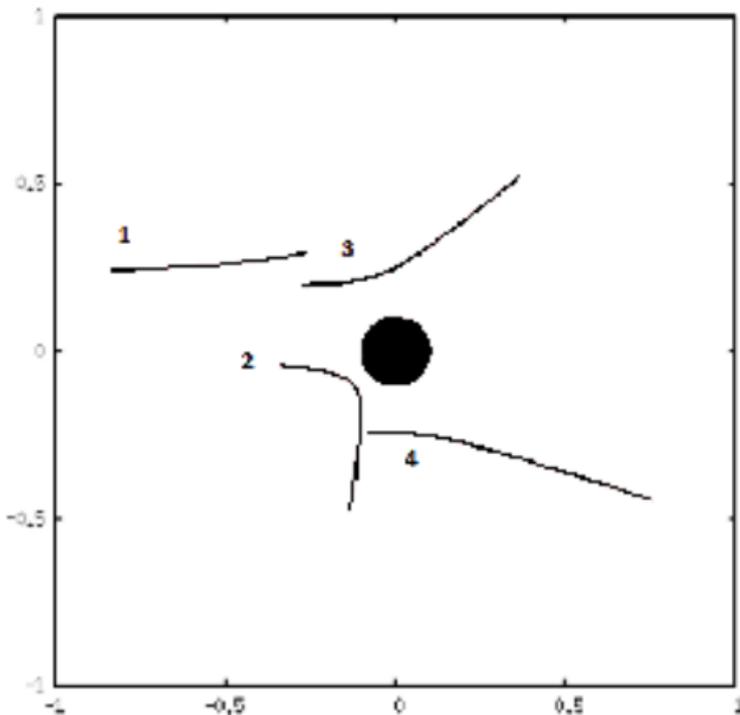
# Масштабируемость

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

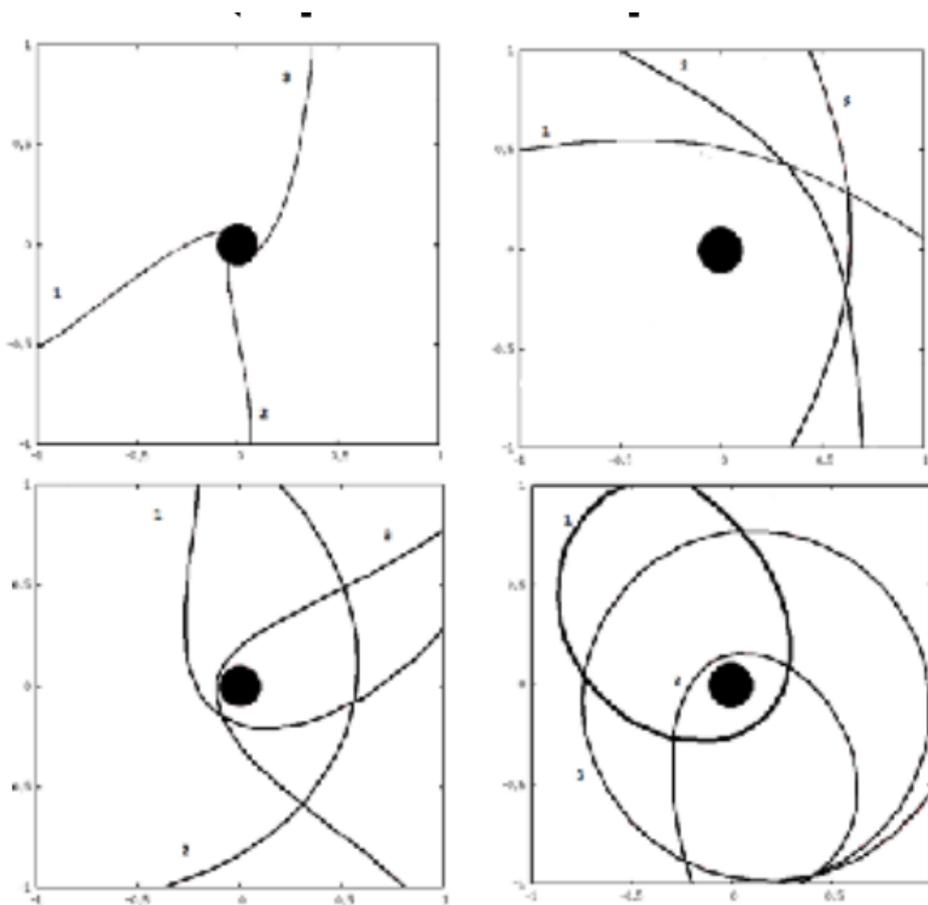
# Результаты(траектории ионов)

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



(1)	x= 0.83	y= 0.24	v <sub>x</sub> = 8300.03	v <sub>y</sub> = 690.93
(2)	x=-0.33	y= 0.04	v <sub>x</sub> = 0776.53	v <sub>y</sub> =-2503.78
(3)	x=-0.27	y= 0.19	v <sub>x</sub> = 21636.98	v <sub>y</sub> = -68.12
(4)	x=-0.07	y=-0.24	v <sub>x</sub> = 21862.95	v <sub>y</sub> =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