

Алгоритмы прореживания ансамбля макрочастиц для параллельного моделирования лазерной плазмы*

А. Гоносков^{1,2,4}, С. Бастраков³, А. Башинов², В. Волокитин¹, Е. Ефименко², И. Мееров¹

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского¹

Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород²

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Germany³

University of Gothenburg, Sweden⁴

Моделирование временной динамики плазмы методом частиц в ячейках является одним из востребованных направлений применения суперкомпьютерных вычислений. Численные моделирования на основе этого метода обеспечивают основу как для проектирования дорогостоящих экспериментов, так и для теоретического анализа сложных систем в медицине, астрофизике и в других областях. Одной из главных идей, обеспечивающих эффективность моделирования, является представление множества заряженных частиц плазмы существенно меньшим количеством макрочастиц, каждая из которых ассоциируется с некоторым числом реальных частиц. Число частиц, ассоциируемых с одной макрочастицей, называется её весом. Увеличение веса является эффективным средством радикального уменьшения объема требуемых вычислительных ресурсов, но при слишком больших значениях веса представление плазмы слишком малым числом «тяжелых» макрочастиц естественно может приводить к возникновению существенных шумовых отклонений в распределениях плотности частиц, что может исказить или даже полностью менять динамику плазмы по сравнению с реальностью.

В последние годы появилась проблема моделирования процессов генерации и сопутствующей динамики электрон-позитронной плазмы в сверхсильных лазерных полях, в которых число частиц плазмы может увеличиваться на множество порядков, создавая неудовлетворительные требования по вычислительным ресурсам суперкомпьютера. Актуальность этой задачи связана с необходимостью проектирования экспериментов на создаваемых и проектируемых сегодня крупномасштабных лазерных комплексах ELI-beamlines, VULCAN, CORELS и XCELS. Потребности моделирования указанных сценариев обозначили принципиально новую проблему: как сформировать совокупность меньшего числа макрочастиц с большим весом без существенного влияния на моделируемый процесс так, чтобы удовлетворить имеющимся ограничениям на вычислительные ресурсы суперкомпьютера?

Проблема динамической оптимизации ансамбля макрочастиц решалась и ранее, например, для повышения эффективности моделирования процессов ионизации [1]. Однако ранее требовалось сократить число макрочастиц не более чем в несколько раз. При моделировании каскадной генерации пар число частиц может возрасти на десять порядков и более, поэтому накопление даже малых неточностей и отклонений может приводить к сложно контролируемым артефактам. При этом точность и эффективность моделирования может в значительной степени определяться методикой оптимизации ансамбля макрочастиц. Среди обсуждаемых в литературе методик можно выделить две основные стратегии – прореживание (thinning) [2-4] и слияние (merging) [5,6]. Стратегия прореживания заключается в удалении случайно выбираемых макрочастиц ансамбля одновременно с увеличением веса остальных частиц. Стратегия слияния подразумевает выделение кластеров плотного расположения частиц в фазовом пространстве (координата-импульс) и замена всех частиц в кластере на одну в точке «центра масс» в фазовом пространстве. Модификацией этой стратегии является слияние частиц в пару частиц, что позволяет обеспечить сохранение импульса, энергии и числа частиц [6].

Мы проводим сравнительный анализ стратегий динамической оптимизации ансамбля макрочастиц. Изучаются следующие основные подходы: простое прореживание, прореживание с выравниванием, прореживание с сохранением общего числа частиц, прореживание с сохранением общей энергии, объединение в среднюю точку, объединение в случайную частицу из кластера. Для сравнения стратегий была выбрана следующая модельная задача. Рассматриваются

* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Нижегородской области в рамках научного проекта № 18-47-520001.

процессы взаимодействия встречных потоков электронов и позитронов на фоне потока ионов, обеспечивающего квазинейтральность всей плазмы. Динамика плазмы в этом случае подвержена неустойчивости Вэйбелевского типа. В результате развития неустойчивости из шумов возникает магнитное поле, поперечное потоку плазмы, под действием которого плазма подвергается сильному расслоению. Согласно последним исследованиям, подобные процессы могут происходить вблизи компактных астрофизических объектов [7], причем энергетика плазменных потоков может быть настолько высокой, что генерируемое магнитное поле может приводить к излучению гамма-фотонов и их распаду на электрон-позитронные пары. Поскольку неустойчивость является ярким примером процесса, чрезвычайно чувствительного к шумовым отклонениям полей и плотностей частиц, моделирование этого процесса может выявить влияние стратегий оптимизации ансамбля частиц на динамику плазмы.

В проведенном нами эксперименте в начальный момент времени были заданы малые периодические отклонения плотности частиц в поперечном направлении, что приводит к развитию неустойчивости с регулярной периодической структурой. В этих условиях о степени влияния той или иной методики оптимизации ансамбля можно судить по искажению или воздействию на развивающуюся регулярную структуру, а также по амплитуде нерегулярных отклонений, развивающихся из привносимого шума. При этом можно количественно сравнить методики, определив для каждой из них минимальное количество вычислительных ресурсов, необходимых для корректного моделирования. Полученные результаты указывают на проявление различного влияния рассмотренных стратегий оптимизации ансамбля. Так, выравнивающее прореживание оказывает наиболее существенное влияние на пространственную структуру развивающейся неустойчивости. Объединение со стохастическими отклонениями также оказывает существенное влияние. Показатели темпа развития неустойчивости указывают на более сложные проявления. На ранних этапах наиболее близкие к эталонному моделированию результаты дают прореживания с сохранением заряда и энергии. Однако на более поздних этапах наиболее точные результаты дают объединение и комплексная процедура «прореживание с выравниванием + прореживание с сохранением общей энергии».

Эксперименты выполнялись на суперкомпьютерах МВС-10П (МЦЦ РАН) и Kebnekaise (HPC2N). Запуски на узлах, оснащенных двумя процессорами Intel Xeon Gold 6132 и 192 ГБ ОЗУ, показали, что даже в задаче с небольшим начальным количеством частиц экспоненциальный рост числа частиц не позволяет выполнить расчет без использования прореживания. Применение стратегий динамической оптимизации ансамбля позволяет не только сохранять физические свойства системы, но и укладываться в ограничения по памяти. При этом эффективность масштабируемости в многопоточном режиме (использовалась технология OpenMP) при использовании 28 ядер составляет около 50%, один эксперимент требует около 100 ядро-часов. В докладе будет представлен сравнительный анализ стратегий в контексте удовлетворения требований по памяти, приведены результаты производительности и масштабируемости расчетов.

Литература

1. Chen M. et al. Numerical modeling of laser tunneling ionization in explicit particle-in-cell codes // *J. Comput. Phys.*, 2013. V. 236. pp. 220–228. DOI: 10.1016/j.jcp.2012.11.029.
2. Timokhin A.N. Time-dependent pair cascades in magnetospheres of neutron stars – I. dynamics of the polar cap cascade with no particle supply from the neutron star surface // *Monthly Notices of the Royal Astr. Soc.*, 2010. V. 408(4). pp. 2092–2114. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2010.17286.x.
3. Lapenta G., Brackbill J.U. Dynamic and selective control of the number of particles in kinetic plasma simulations // *J. of Comp. P.*, 1994. V.115(1). pp. 213–227. DOI: 10.1006/jcph.1994.1188.
4. Nerush E. et al. Laser field absorption in self-generated electron-positron pair plasma // *Phys. Rev. Lett.*, 2011. V. 106:035001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.035001.
5. Lapenta G. Particle rezoning for multidimensional kinetic particle-in-cell simulations // *Journal of Computational Physics*, 2002. V. 181(1). pp. 317–337. DOI: 10.1006/jcph.2002.7126.
6. Vranic T. et al. Particle merging algorithm for PIC codes // *Comp. Phys. Comm.*, 2015. V. 191. pp. 65–73. DOI: 10.1016/j.cpc.2015.01.020.
7. Nerush E.N., Serebryakov D.A., Kostyukov I.Yu. Weibel Instability in Hot Plasma Flows with the Production of Gamma-Rays and Electron–Positron Pairs // *The Astrophysical Journal*, 2017. V. 851:129. DOI: 10.3847/1538-4357/aa9d1a.