6 апреля 2010

Использование CUDA в расчете динамики пучка

С.Б. Ворожцов, В.Л. Смирнов, Е.Е. Перепелкин Дубна, ОИЯИ

http://parallel-compute.ru



Циклотрон

• Постановка задачи

• Численные методы

• Программная реализация на CUDA

• Результаты

http://cbda.jinr.ru

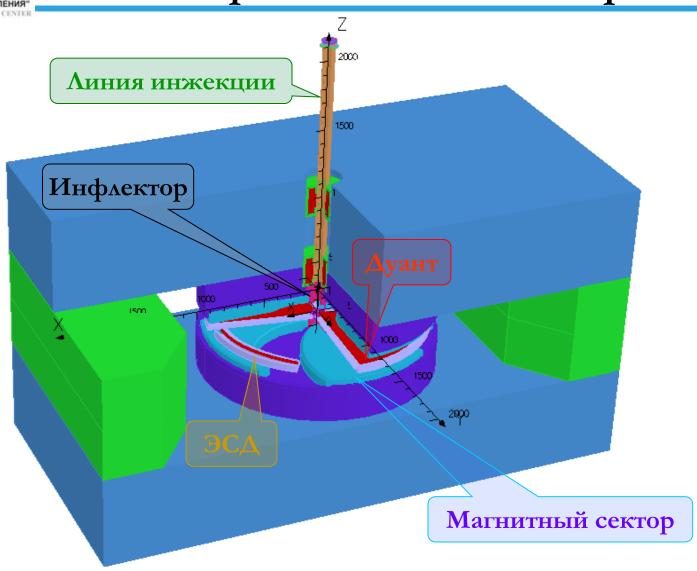
CBDA: Cyclotron Beam Dynamic Analysis code



Постановка задачи

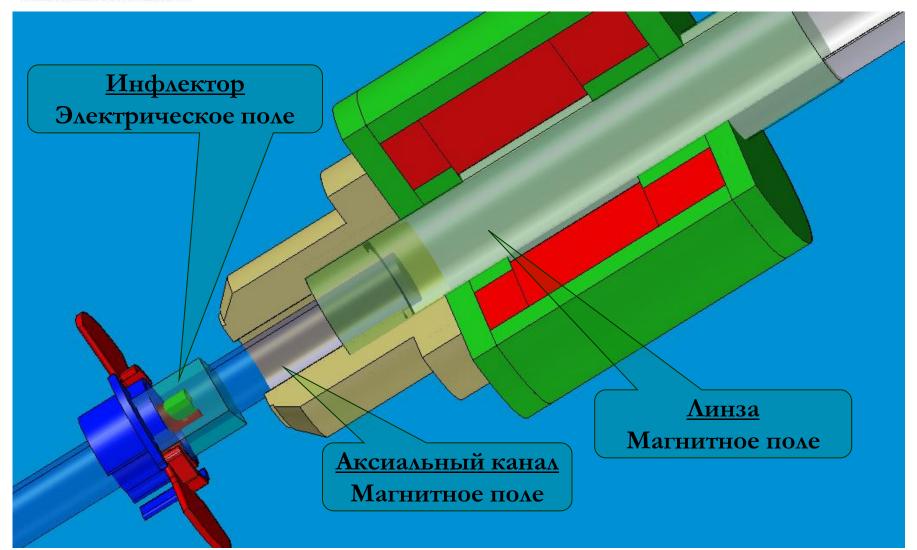


Компьютерная модель циклотрона





Области задания карт полей





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



Уравнения движения

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

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

$$d \left(\vec{r} \right) = \vec{r} \left(\vec{r} \right) + \vec{r} \left(\vec{r} \right) + \vec{r} \left(\vec{r} \right) + \vec{r} \left(\vec{r} \right) = \vec{r}$$

$$\begin{cases} m_{i} \frac{d}{dt} (\gamma_{i} \vec{v}_{i}) = q_{i} (\vec{E}_{ext} (\vec{r}_{i}, t) + \vec{E}_{s} (\vec{r}_{i}, t) + [\vec{v}_{i}, \vec{B}_{ext} (\vec{r}_{i})]) \\ \gamma_{i} = 1 / \sqrt{1 - \beta_{i}^{2}}, \beta_{i} = \frac{v_{i}}{c} \\ \vec{r}_{i}|_{t=t_{i}} = \vec{r}_{i}^{(0)}, \vec{v}_{i}|_{t=t_{i}} = \vec{v}_{i}^{(0)}, unu \ \vec{r}_{i}|_{t=0} = \vec{r}_{i}^{(0)}, \vec{v}_{i}|_{t=0} = \vec{v}_{i}^{(0)} \\ 1 \leq i \leq N, \vec{r}_{i} \in V \end{cases}$$



Пространственный заряд

$$div\vec{E}_{s} = \frac{\rho}{\varepsilon_{0}}, \qquad rot\vec{B}_{s} = \mu_{0}\vec{J}_{s} + \frac{1}{c^{2}}\frac{\partial}{\partial t}\vec{E}_{s}$$

$$rot\vec{E}_{s} = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{B}_{s}, \qquad div\vec{B}_{s} = 0, \quad \frac{1}{\mu_{0}\varepsilon_{0}} = c^{2}$$

РІС метод

$$\vec{E}_{s} = -\nabla \varphi$$

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

РР метод

$$\vec{E}_{s}(\vec{r}_{i}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_{0}} \sum_{j\neq i}^{N} \frac{q_{j}}{\left|\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}\right|^{3}} (\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}), \quad i = 1...N$$

$$\vec{E}_{s}(j \to i) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_{0}} \frac{q_{j}}{R^{3}} (\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}), \quad \left|\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}\right| < R$$



Численные методы



Уравнение движения

Уравнение движения из постановки задачи

$$m_{i} \frac{d}{dt} \left(\gamma_{i} \vec{v}_{i} \right) = q_{i} \left(\vec{E}_{ext} \left(\vec{r}_{i}, t \right) + \vec{E}_{s} \left(\vec{r}_{i}, t \right) + \left[\vec{v}_{i}, \vec{B}_{ext} \left(\vec{r}_{i} \right) \right] \right), \quad i = 1, \dots, N$$

можно представить в упрощенном виде, дополнив его вторым уравнением для определения координат частиц

$$\begin{cases} \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{f}\left(t, \vec{r}_i, \vec{v}_i\right) \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases} \qquad \begin{cases} \vec{v}_i \big|_{t=t_0} = \vec{v}_i^{(0)} \\ \vec{r}_i \big|_{t=t_0} = \vec{r}_i^{(0)} \end{cases}$$



Пример решения ОДУ

Рассмотрим решение обыкновенного дифференциального уравнения (ОДУ) методом Рунге -Кутта

Задача Коши

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f(t, x) \\ x|_{t=t_0} = x_0 \end{cases}$$

k – номер итерации по времени, τ – шаг по времени

$$x_{k+1} = x_k + \frac{\tau}{6} \left(kx_1 + 2 \cdot kx_2 + 2 \cdot kx_3 + kx_4 \right)$$

$$kx_1 = f \left(t_k, x_k \right)$$

$$kx_2 = f \left(t_k + \frac{\tau}{2}, x_k + \frac{kx_1}{2} \right)$$

$$kx_3 = f \left(t_k + \frac{\tau}{2}, x_k + \frac{kx_2}{2} \right)$$

$$kx_4 = f \left(t_k + \tau, x_k + kx_3 \right)$$



Метод Рунге - Кутта

$$vx_{k+1} = vx_k + \frac{\tau}{6} \left(kvx_1 + 2 \cdot kvx_2 + 2 \cdot kvx_3 + kvx_4 \right)$$

$$vy_{k+1} = vy_k + \frac{\tau}{6} \left(kvy_1 + 2 \cdot kvy_2 + 2 \cdot kvy_3 + kvy_4 \right)$$

$$vz_{k+1} = vz_k + \frac{\tau}{6} \left(kvz_1 + 2 \cdot kvz_2 + 2 \cdot kvz_3 + kvz_4 \right)$$

$$x_{k+1} = x_k + \frac{\tau}{6} \left(kx_1 + 2 \cdot kx_2 + 2 \cdot kx_3 + kx_4 \right)$$

$$y_{k+1} = y_k + \frac{\tau}{6} \left(ky_1 + 2 \cdot ky_2 + 2 \cdot ky_3 + ky_4 \right)$$

$$z_{k+1} = z_k + \frac{\tau}{6} \left(kz_1 + 2 \cdot kz_2 + 2 \cdot kz_3 + kz_4 \right)$$



Метод Рунге - Кутта

$$\begin{cases} kx_1 = v_x \left(t_k, x_k, y_k, z_k, vx_k, vy_k, vz_k \right) \\ ky_1, kz_1 \\ kvx_1 = f_x \left(t_k, x_k, y_k, z_k, vx_k, vy_k, vz_k \right) \\ kvy_1, kvz_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} kx_2 = v_x \left(t_k + \frac{\tau}{2}, x_k + \frac{kx_1}{2}, y_k + \frac{ky_1}{2}, z_k + \frac{kz_1}{2}, vx_k + \frac{kvx_1}{2}, vy_k + \frac{kvy_1}{2}, vz_k + \frac{kvz_1}{2} \right) \\ ky_2, kz_2 \\ kvx_2 = f_x \left(t_k + \frac{\tau}{2}, x_k + \frac{kx_1}{2}, y_k + \frac{ky_1}{2}, z_k + \frac{kz_1}{2}, vx_k + \frac{kvx_1}{2}, vy_k + \frac{kvy_1}{2}, vz_k + \frac{kvz_1}{2} \right) \\ kvy_2, kvz_2 \end{cases}$$



Метод Рунге - Кутта

$$\begin{cases} kx_3 = v_x \left(t_k + \frac{\tau}{2}, x_k + \frac{kx_2}{2}, y_k + \frac{ky_2}{2}, z_k + \frac{kz_2}{2}, vx_k + \frac{kvx_2}{2}, vy_k + \frac{kvy_2}{2}, vz_k + \frac{kvz_2}{2} \right) \\ ky_3, kz_3 \\ kvx_3 = f_x \left(t_k + \frac{\tau}{2}, x_k + \frac{kx_2}{2}, y_k + \frac{ky_2}{2}, z_k + \frac{kz_2}{2}, vx_k + \frac{kvx_2}{2}, vy_k + \frac{kvy_2}{2}, vz_k + \frac{kvz_2}{2} \right) \\ kvy_3, kvz_3 \\ kx_4 = v_x \left(t_k + \tau, x_k + kx_3, y_k + ky_3, z_k + kz_3, vx_k + kvx_3, vy_k + kvy_3, vz_k + kvz_3 \right) \\ ky_4, kz_4 \\ kvx_4 = f_x \left(t_k + \tau, x_k + kx_3, y_k + ky_3, z_k + kz_3, vx_k + kvx_3, vy_k + kvy_3, vz_k + kvz_3 \right) \\ kvy_4, kvz_4 \end{cases}$$



Решение краевой задачи

$$\begin{cases} \Delta \varphi(p) = -\frac{\rho(p)}{\varepsilon_0}, & p \in \Omega \\ \varphi|_{\Gamma} = 0 \end{cases}$$

При поиске коэффициентов Фурье используется алгоритм БПФ

(Быстрого Преобразования Фурье)

 $ho(x_i,y_j,z_s)$ – необходимо найти из распределения частиц

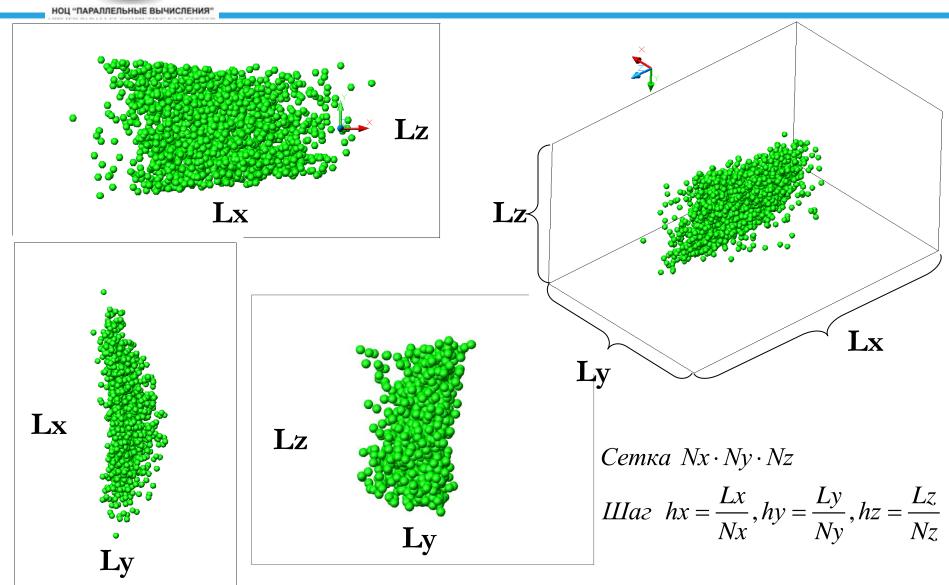
$$\overline{\rho}(n,m,k) = \frac{8}{N_x N_y N_z} \sum_{s=1}^{N_z - 1} \sum_{j=1}^{N_y - 1} \sum_{i=1}^{N_x - 1} \rho(x_i, y_j, z_s) \sin\left(\frac{\pi ni}{N_x}\right) \sin\left(\frac{\pi mj}{N_y}\right) \sin\left(\frac{\pi ks}{N_z}\right)$$

$$\overline{\varphi}(n,m,k) = -\overline{\rho}(n,m,k) \left[\left(\frac{\pi n}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{\pi m}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{\pi k}{L_z} \right)^2 \right]^{-1}$$

$$\varphi(x_i, y_j, z_s) = \sum_{k=1}^{N_z - 1} \sum_{m=1}^{N_y - 1} \sum_{n=1}^{N_x - 1} \overline{\varphi}(n, m, k) \sin\left(\frac{\pi ni}{N_x}\right) \sin\left(\frac{\pi mj}{N_y}\right) \sin\left(\frac{\pi ks}{N_z}\right)$$

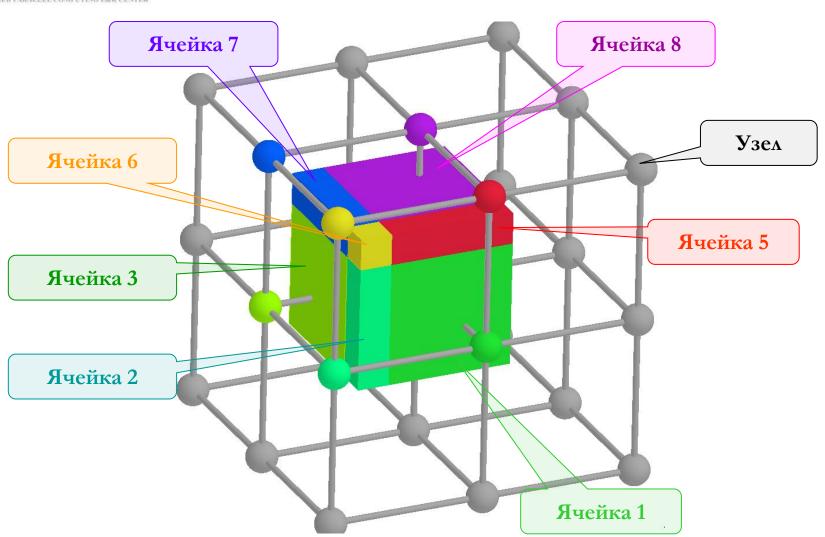


Задание области для краевой задачи



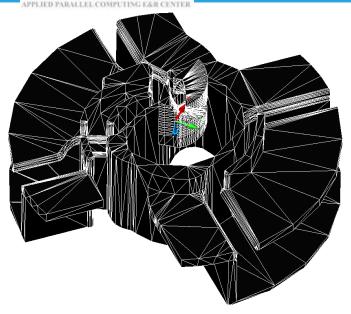


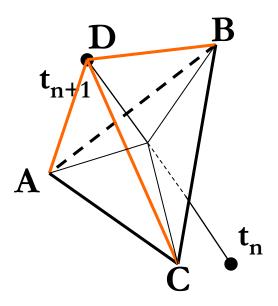
Раздача плотности заряда





Потери частиц





Если точка D принадлежит треугольнику ABC, тогда

$$S_{\Delta\!ADC} + S_{\Delta\!ADB} + S_{\Delta\!CDB} = S_{\Delta\!ABC}$$

Условие пересечения $S_{\Delta ADC} + S_{\Delta ADB} + S_{\Delta CDB} < S_{\Delta ABC} + \varepsilon_{\Delta CDB}$

где ϵ_{Δ} – допустимое отклонение от поверхности



Программная peaлизация на CUDA



Функции ядра

- Track (карты полей, координаты и скорости частиц)
 - метод Рунге-Кутта
- Losses (геометрия установки, координаты частиц)
 - проверка пересечений с геометрией
- Rho (координаты частиц)
 - раздача заряда в узлы сетки
- FFT (функция плотности заряда или потенциал)
 - БПФ по базисным функциям $\sin(\pi n/N)$
- PoissonSolver (Фурье коэффициенты)
 - решение краевой задачи
- E_SC (потенциал электрического поля)
 - поиск электрического поля

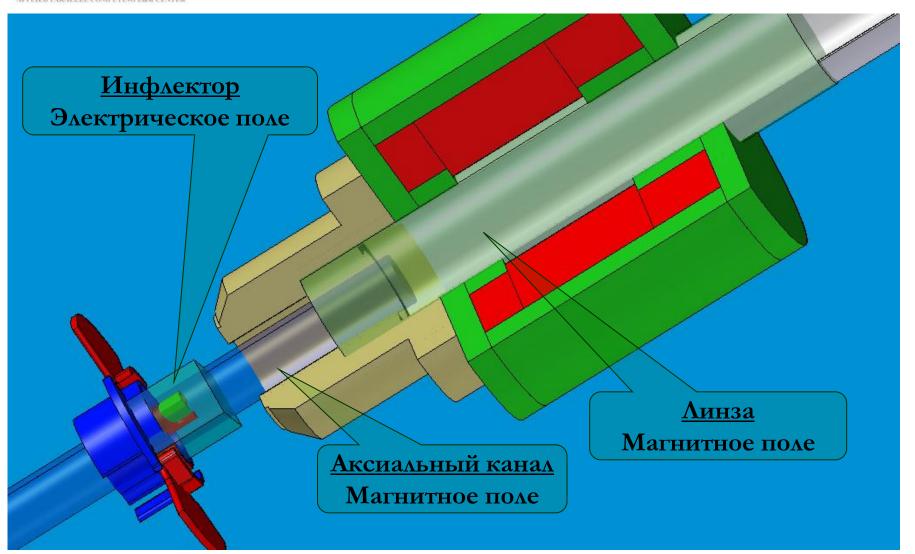


__global__ void Track ()

- 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



Проблема количества "if, goto, for"





__global__ void Losses ()

- Нити одного блока копируют вершины треугольников из global в shared память.
- Синхронизация нитей после копирования треугольников __syncthreads()
- Каждой частице соответствует номер нити:
 - int n = threadIdx.x+blockIdx.x*blockDim.x;
- Проверка условия пересечения частицей с номером n, загруженных в shared память, треугольников
- Для каждого блока геометрии есть своя функция Losses



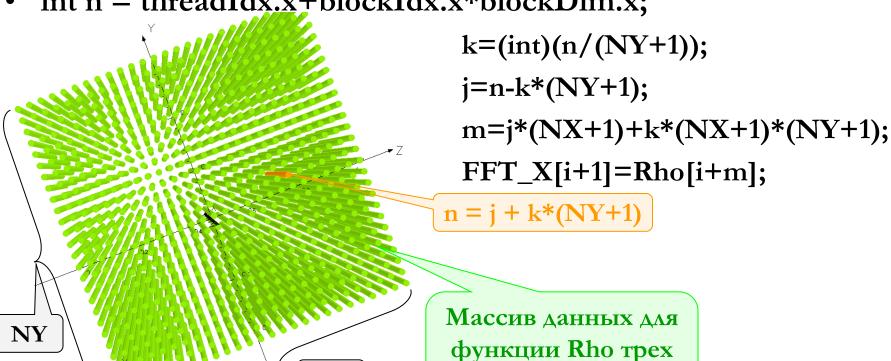
__global__ void Rho

- Каждая частица с номером n = threadIdx.x + blockIdx.x*blockDim.x дает свой вклад, в окружающие ее узлы. Для этого по координатам частицы определяется какой ячейки она принадлежит
- Одна частица может дать вклад в 8 ближайших узлов. Таким образом, каждая нить заполняет свои 16 ячеек в общем массиве вклада: 8 номеров узлов и 8 значений вклада.
- Далее производится сложение этих вкладов для каждого узла.



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;



переменных



__global__ PoissonSolver ()

• Номер нити

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

• Каждая нить находит значение коэффициентов Фурье PhiF потенциала Phi

```
PhiF_{ind(i,j,k)} = -RhoF_{ind(i,j,k)} / (kx_i^2 + ky_j^2 + kz_k^2)
B узле с номером:
ind(i,j,k) = i+j*(NX+1)+k*(NX+1)*(NY+1),
где
k = (int)(n/(NX+1)*(NY+1));
j = (int)(n-k*(NX+1)*(NY+1))/(NX+1);
i = n-j*(NX+1)-k*(NX+1)*(NY+1);
```

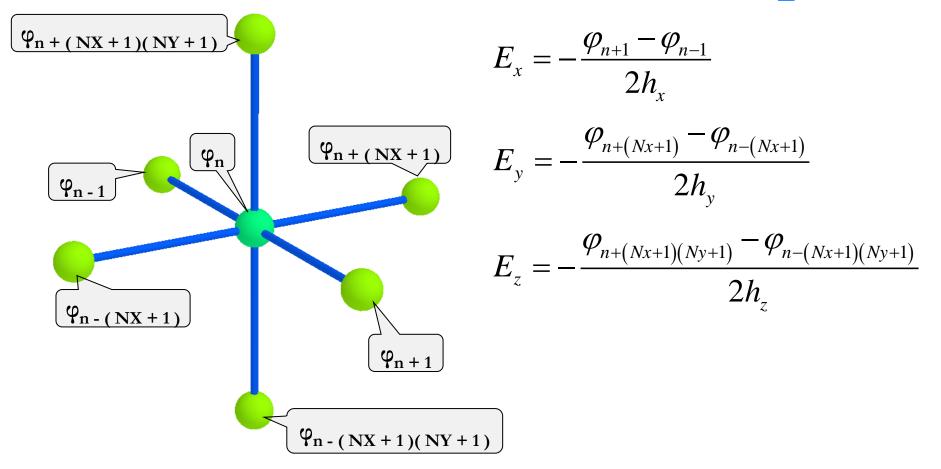
• RhoF – коэффициенты Фурье для функции плотности заряда Rho.



$__{global}__{E_SC()}$

• Вычисление электрического поля в узле с номером

int n = threadIdx.x+blockIdx.x*blockDim.x+st_ind

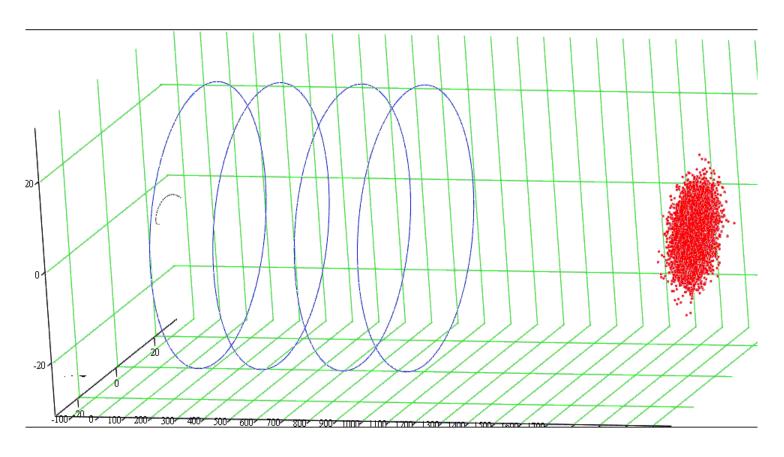




Результаты

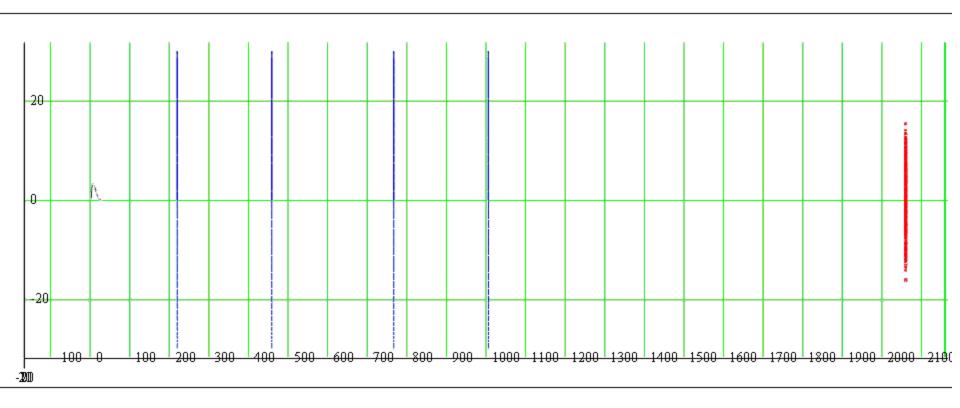


Аксиальная инжекция пучка



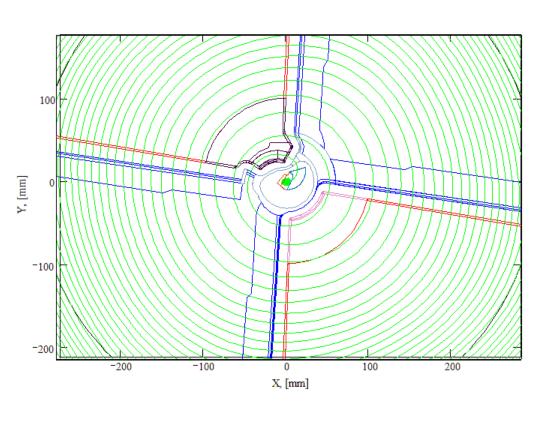


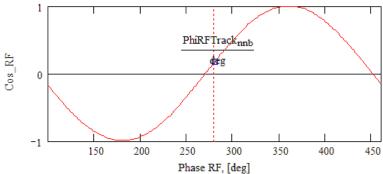
Процесс банчировки пучка





Ускорение в циклотроне





$$PhiRF_{nmb} = -79.7 \deg$$

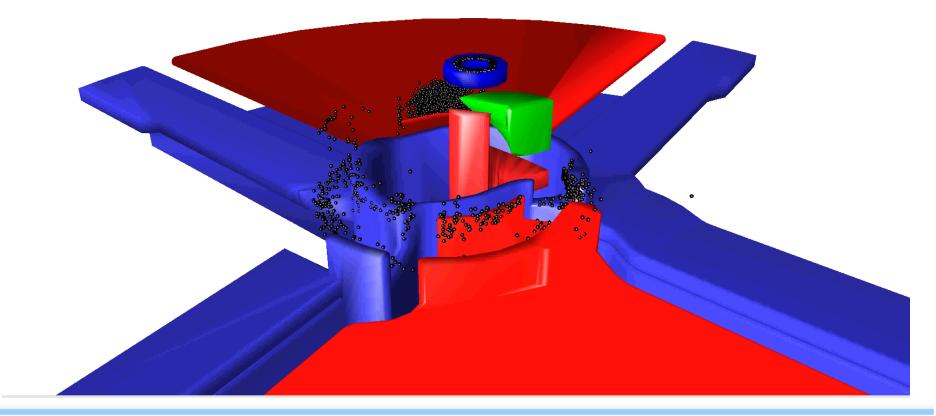
$$Energy_{nnb} = 45 \text{ keV}$$



Анимация

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

Program_version1

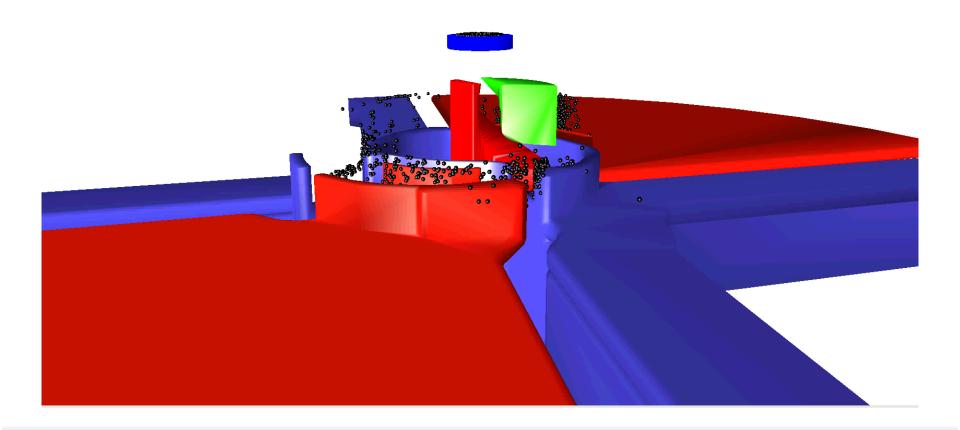




Анимация

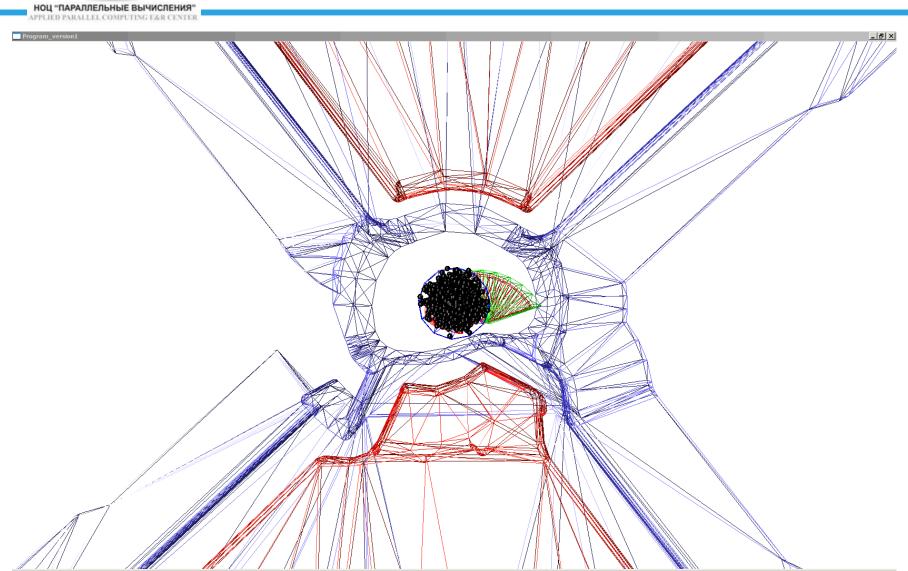
HOЦ "ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ" APPLIED PARALLEL COMPUTING E&R CENTER

Program_version1





Анимация

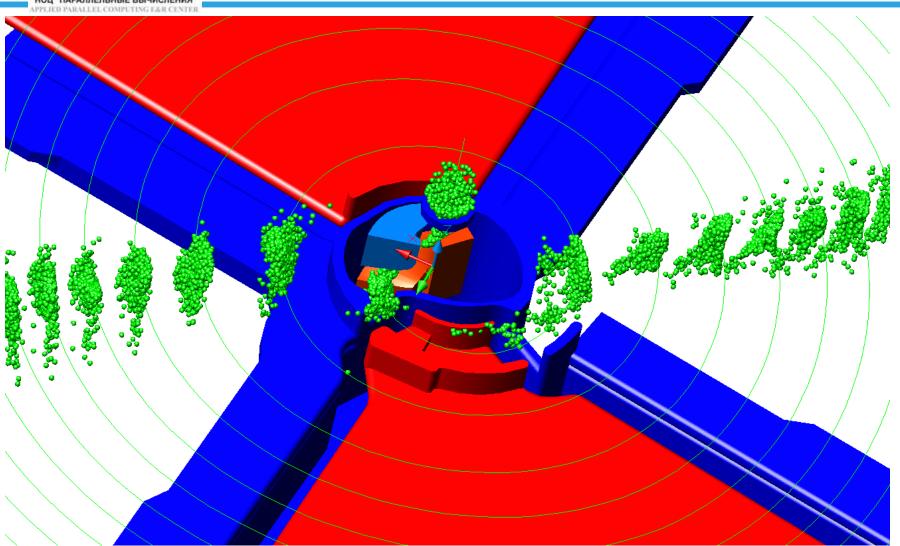




Потери частиц

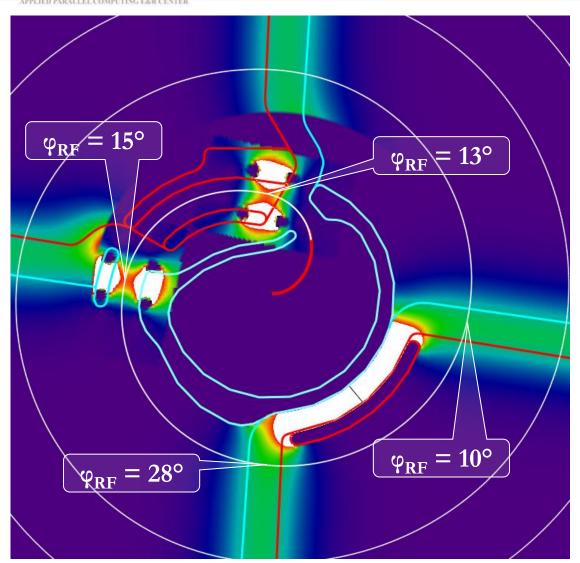


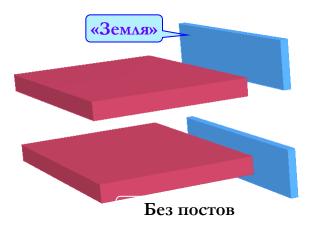
Ускорение банчей



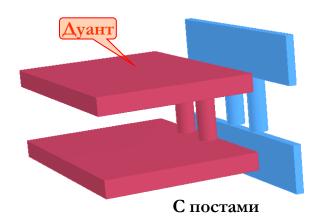


Оптимизация центральной области



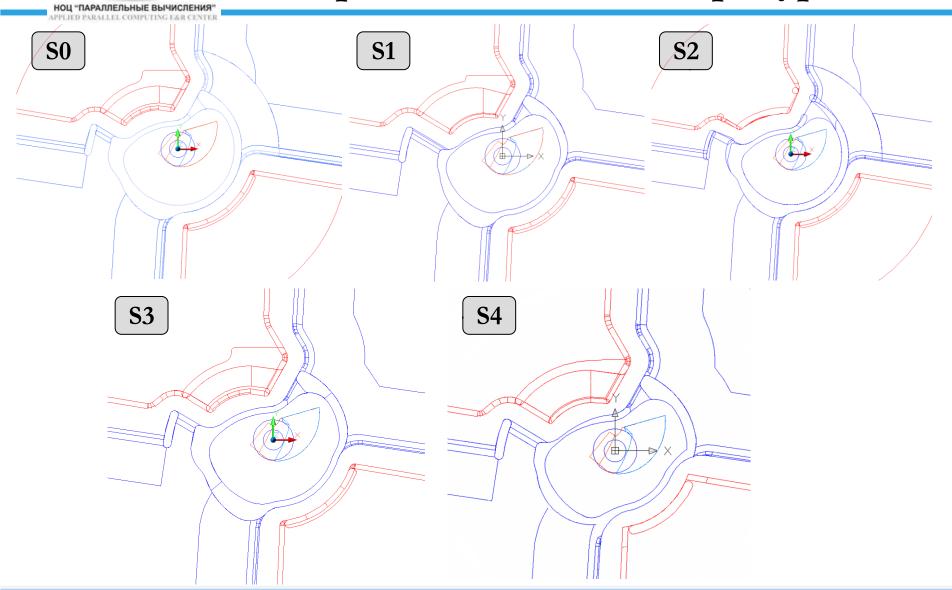


$$\mathbf{F} = \mathbf{Z}\mathbf{U}_{\mathbf{RF}} - \mathbf{W}_{\mathbf{GAP}}$$



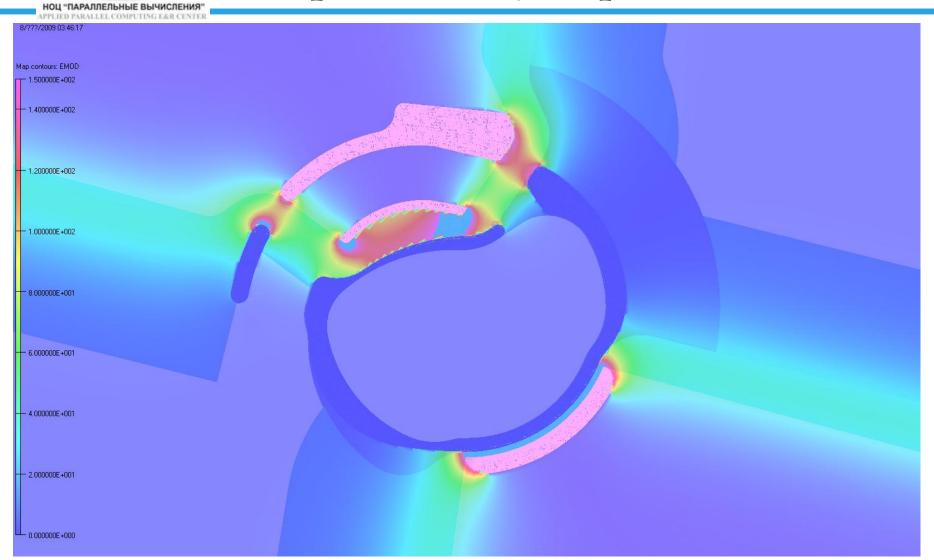


Выбор оптимальной конфигурации





Распределение ускоряющего поля





Производительность на 8800GTX

Функции*	Время, [мс]		Ускорение,
	CPU**	GPU	[pa3]
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



Сравнение CPU и GeForce 8800GTX

Число	Время вычи	Ускорение,	
частиц	CPU*	GPU	[pa3]
1,000	3 мин. 19 с.	12 c.	17
10,000	34 мин. 14 с.	42 c.	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



Сравнение CPU с Tesla C1060

**	Время вычислений		X /
Число частиц	СР U 2.5ГГц	GPU C 1060	Ускорение, [раз]
1,000	3 мин. 12 с.	11 c.	18
10,000	32 мин. 24 с.	27 c.	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



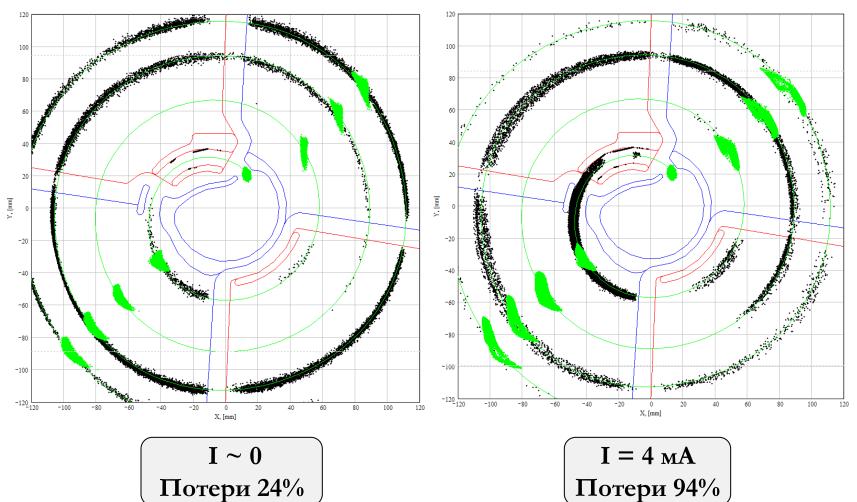
Сравнение CPU с Tesla C1060

Число	Время вычі	Ускорение,	
частиц	СР U 2.5 ГГц	GPU C 1060	[pa3]
10,000	33 мин. 36 с.	44 c.	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



Эффект пространственного заряда





Заключение

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