Super Computing in Accelerator simulations
- Electron Gun simulation using GPGPU -

K. Ohmi, KEK-Accel

Accelerator Physics seminar

2009.11.19

Super computers in KEK

- HITACHI SR11000

  共有メモリー型計算機　ノードあたりPOWER5、16台24GBの共有メモリーでつながれている。さらに16ノードがネットワークでつながれている。理論性能はノードあたり134GFlops, total 2.15 TFlops

- IBM Blue Gene

  分散メモリー型計算機　ノードあたりPowerPC440、2台512MBメモリー共有。ネットワークでつながれたノード数10,240。理論性能は計57.3TFlops

加速器シミュレーション

- 粒子の軌道追跡。粒子平均としてのエミッタンス、ルミノシティ、寿命の評価
- 円形加速器、放射減衰時間、数1000ターン。シミュレーションは数1000x3倍くらい行われ、平衡状態の様子を求める。
- 線形加速器。シングルパスを精密に計算。

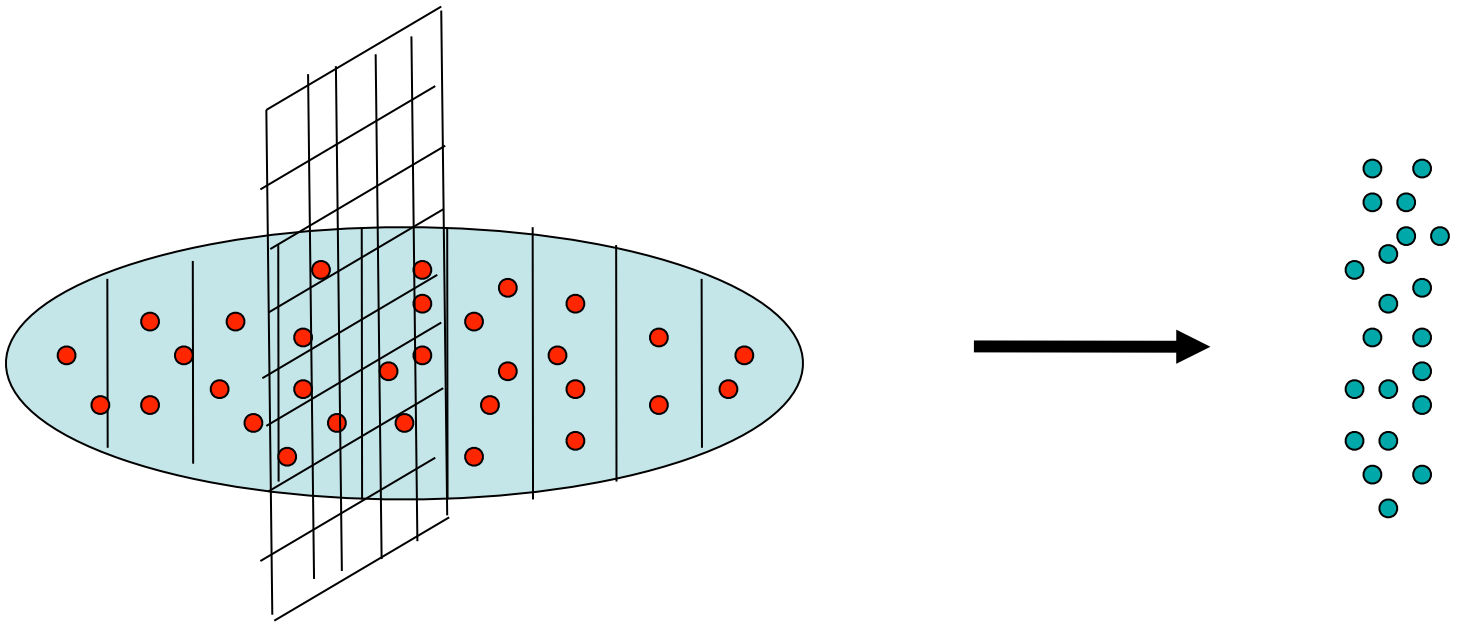
代表的なシミュレーション方法

Particle In Cell (PIC)

- ビームを粒子の集まりと考える。
- (自己)相互作用を計算する際、粒子全体の平均場を計算し、各粒子に作用させる。
- 平均場の計算によく使われるのが、Particle In Cell 法。
- Particle-Particle相互作用に基づいたシミュレーションは加速器ではあまり行われない。

粒子ーメッシュ法（Particle In Cell）によるシミュレーション

- 電子雲を加速器の特定の場所何箇所かに配置。
- ビームと電子雲が衝突するごとに、ビームの進行方向に垂直な面をメッシュで切り,電子雲とビームの電場を2次元的に求め、互いの相互作用を計算する。
- バンチは進行方向に20-30に分割。



Particle In Cell (PIC)

- 空間(2-3次元)をメッシュで分割。
- 各cellに入っている、粒子数を数える。
- 電磁場を計算。たいていポアッソン方程式＋αで近似。
- 電磁場を粒子に作用させる。

ポアッソン方程式の解法

- 境界条件により適する解法が異なる。
- 自由境界条件　グリーン関数を使用。積分にFFTを使う。

$$\int G(r-r')\rho(r')dr'$$

- 長方形境界　差分連立方程式を解く。サイクリックリダクション(CR)法、FFTを組み合わせたCR法。
- 任意形状境界　有限要素法、連立方程式

加速器におけるシミュレーション

- 光速で並行に運動する荷電粒子は相互作用しない。
- 非相対論的荷電粒子の場合は電磁場で$1/\gamma^2$、質量から$1/\gamma$の作用(d^2x/dt^2)を受ける。
- 光速で運動する荷電粒子の電磁場は運動方向に垂直な面内に限定される。
- ビームサイズに比べバンチ長が長ければ、電磁場は2次元的である。

PICを使った加速器シミュレーション

- Beam-beam相互作用、ビーム内での相互作用は無視、衝突相手の平均場を受ける。
- 空間電荷効果、ビーム内の相互作用、自分自身の平均場を受ける。
- 電子雲不安定性、ビーム一電子雲、それぞれ相手の平均場を受ける。電子雲内は目的により自己場を考慮。

- 円形加速器の場合PIC計算頻度が膨大、10^7-10^8.
- メッシュcell数は100x100-200x200、頻度でlimit

PICと並列計算

- 並列化を粒子に対して行うか、メッシュcellに対して行うか、あるいは両方。
- 粒子に対して行う計算(軌道追跡)と、メッシュに対して行う計算(電磁場)
- 粒子数はメッシュになめらかな分布を作る必要がある。粒子数＞＞cell数。
- 並列化を粒子に対し行い、メッシュ情報を交換し、メッシュに対して並列化し電磁場を求め、ノードに分配する。
- この頻度が多いため、ネットワーク負荷が問題

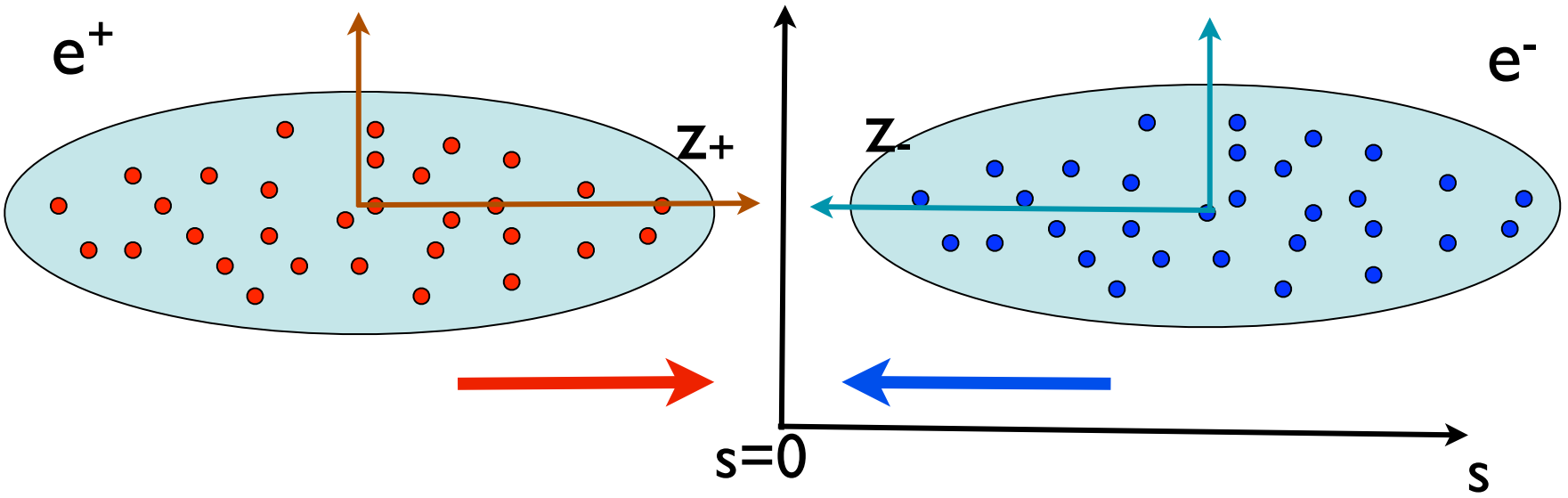
加速器におけるスパコン利用の現状と今後

- 現状ではSR11000タイプの計算機が多用されている。
- KEKBの計算は衝突毎に100回ポアソン方程式を解き、10^4周繰り返し、計10^6。1時間の計算
- SuperKEKBの場合、衝突毎に10^4回x10^4周=10^8をベースとして計算。10倍のCPU速度が望ましい。
- JPARC-MRの加速過程は周回毎10^3回、10^5周でやはり同程度。

GRAPEの可能性

- NxN体問題的解法は加速器ではあまり行われていない。
- 短距離クーロン力の取り扱い
- 計算頻度
- 重心が$1/N^{1/2}$で揺らぐとエミッタンス増大が生ずる。
- 一旦ポテンシャルにした方が、ポテンシャルを固定したり、いろいろな面から調べられる。

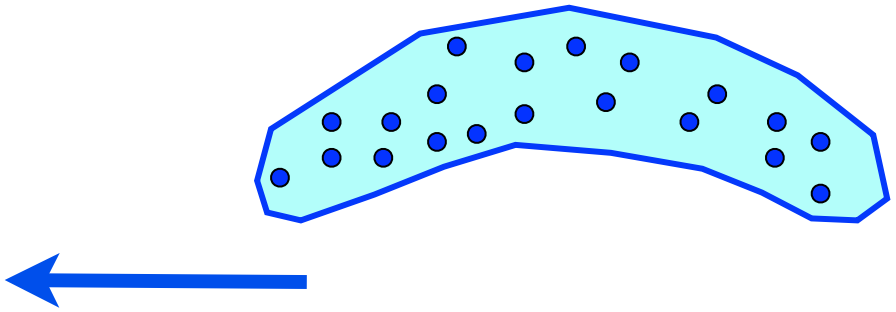
ビームビーム衝突



- 電磁場は進行方向に垂直な面内にのみ形成される。
- 相互作用はそれぞれマクロ粒子の進行方向位置の差の位置でのみ起こる。$s=(z_{+,i}-z_{-,j})/2$
- 衝突は前方から逐次起こる。 $z_{+,i}+z_{-,j}$の大きいほうから小さい方へ。

天体とビーム

- 銀河の衝突は常にすべての粒子が相互作用しあっているが、ビームは２つの粒子が同じsになったときだけ起こる。1回の衝突をN^2の計算1ステップで行える。銀河はN^2xTime step。
- 単純化されている一方逐次計算になってしまう。
- 逐次計算をどこまでまじめに行う必要があるか。ビームのz方向に関する構造をどこまで考える必要があるかに関係。



典型的な計算 (SuperKEKB)

- $10^6 \times 10^6$マクロ粒子の衝突を10^4回繰り返し、平衡分布を求める。衝突が逐次計算になり厳しい。そこで、
- 100スライスに分け、スライス間、$10^4 \times 10^4$マクロ粒子の衝突を100x100スライス分計算し、1回の衝突とし、10^4回繰り返し、平衡分布を求める。つまり$10^4 \times 10^4$マクロ粒子の衝突を10^8 time step。

典型的な計算 (J-PARC)

- 空間電荷、すなわちビーム内粒子同士の電磁場相互作用。
- マクロ粒子を進行方向に分布を持った、円筒形荷電子分布とする。
- 10^5マクロ粒子間の2次元的(式はbeam-beam衝突と同じ)相互作用を10^8 time step計算。

Blue Gene

- メッシュ128x128の倍精度データ128kBを足し合わせるために必要な時間。
- 1.5msx10^8=40h, Glue Geneのメリットを受けられない。

IBM土井氏による調査(2006年11月)

ソースコードを拝見しましたところ，128KBのデータを足し合わせる部分の処理は，MPI_Allreduceでできるようです．この場合，足し合わせた結果rhoxyは，全てのノードに同時に求まりますので，配布する時間は考慮する必要はありません．その後のcalc_potential_psnの処理ですが，この部分を，並列化しないようであれば，全ノードで同じ処理をしてしまえばphiを配布する必要は無いと思います．（可能であれば並列化したほうが良いと思います．）

今回は，上記の条件で，128KBのデータに関しては，足し合わせるのに必要な通信時間のみを試しに測定しました．単純に，128x128の倍精度浮動小数点数をMPI_Allreduceで加算するだけの処理です．
10^8回はちょっと大きすぎるので，10^4回実行したときの経過時間を測定しました．

32ノード，コプロセッサモードの場合（32CPU）： 13.37 sec
32ノード，仮想ノードモードの場合（64CPU）：17.80 sec

10^8回の時間は，おおよそ，その10^4倍だと考えてください。
MPI_Allreduceによる加算の処理は，tree構造のネットワークを利用して行われるため，ノード数がN倍になっても，処理時間はN倍にはなりません．32ノードの場合，32=2^5ですので，512ノードの場合，512=2^9なので，この場合，9/5倍程度時間がかかります．

加速器におけるスパコン利用の現状と今後

- 現状ではSR11000タイプの計算機が多用されている。
- KEKBの計算は衝突毎に100回ポアソン方程式を解き、10^4周繰り返し、計10^6。1時間の計算
- SuperKEKBの場合、衝突毎に10^4回x10^4周=10^8をベースとして計算。10倍のCPU速度が望ましい。
- JPARC-MRの加速過程は周回毎10^3回、10^5周でやはり同程度。

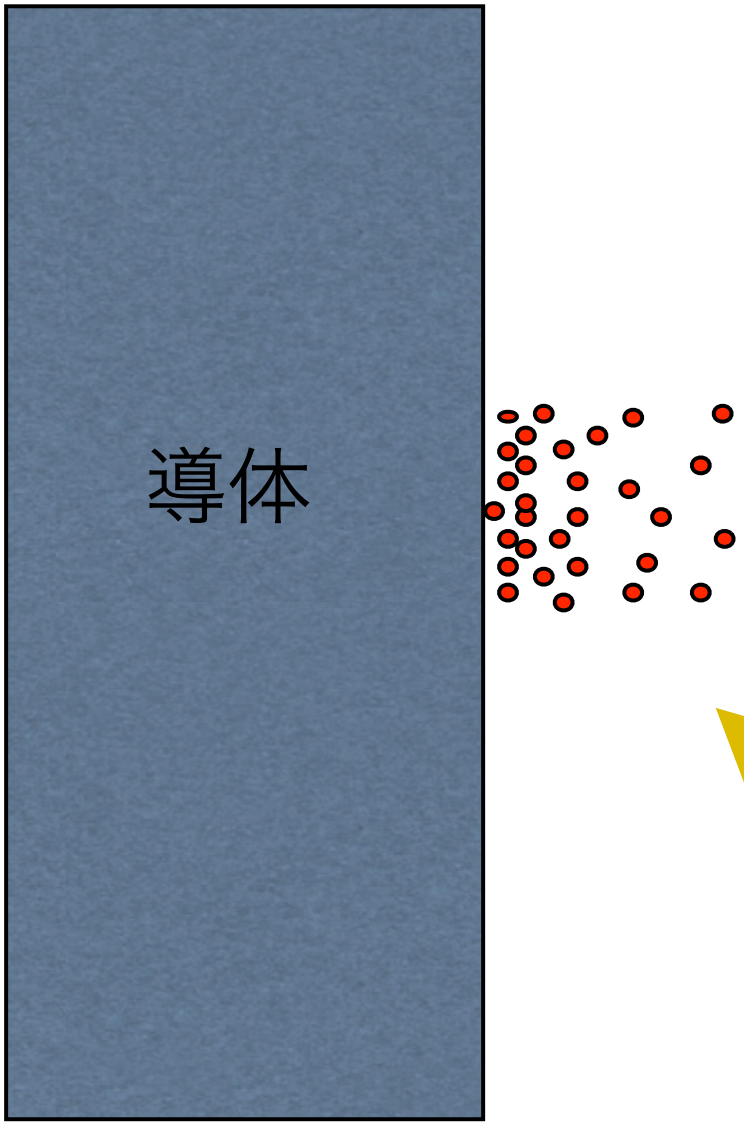
Blue GeneによるJPARC Space charge simulation

- ポテンシャルを準静的に扱う。ポテンシャルを固定すればノード毎のコミュニケーションは無くなる。何周(50周)かごとにポテンシャルを更新。

電子銃のシミュレーション

- HITACHI SR11000 KEK super computer System A
- GPU(Tesla1060)

電子銃のモデル



静電場、RF電場

- 物質表面から放出される光電子、熱電子を電場で加速、引き出す

レーザー光

Electron Gun for KEK cERL

- Q=80 pC (max)
- σr=0.5mm
- σt=10-20 ps
- Ez=7 MV/m V=500 kV
-

PIC solver in KEK-System A
3D Poisson solver

- Boundary condition in free space, φ(∞)=0.
- Green function

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{|\mathbf{r}|}$$

- Potential

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$$

-

Implementation

- Make Green function table

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{|\mathbf{r}|}$$

$$G_{i,j,k} = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \int_{x_i-\Delta x/2}^{x_i+\Delta x/2} \int_{y_j-\Delta y/2}^{y_j+\Delta y/2} \int_{z_k-\Delta z/2}^{z_k+\Delta z/2} \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} d\mathbf{r}$$

$$\int\int\int \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} d\mathbf{r} =$$

$$-\frac{x^2}{2}\tan^{-1}\left(\frac{yz}{x\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right) - \frac{y^2}{2}\tan^{-1}\left(\frac{zx}{y\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right) - \frac{z^2}{2}\tan^{-1}\left(\frac{xy}{z\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right)$$

$$+yz\ln(x+\sqrt{x^2+y^2+z^2}) + zx\ln(y+\sqrt{x^2+y^2+z^2}) + xy\ln(z+\sqrt{x^2+y^2+z^2})$$

- Calculate ρ array from macro particles distribution

$$\rho_{i,j,k}$$

Integration, convolution

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{i',j',k'} G_{i-i',j-j',k-k'}\rho_{i',j',k'}$$

- Direct summation
- Range of the suffix: i=1,Nx, i-i'=1-Nx,Nx-1
- Since $G_{-i,j,k}=G_{i,j.k}$, the G table size can be $N_xN_yN_z$.

Solver using FFT

$$G(\mathbf{k}) = \int G(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

$$\rho(\mathbf{k}) = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

- Convolution

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int G(\mathbf{k}) \rho(\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{k}$$

Discrete space

$$G_{\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^{N_{xyz}} G(\mathbf{r}_i) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) \qquad G(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{N_{xyz}} \sum_{k=1}^{N_{xyz}} G_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i)$$

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^{N_{xyz}} \rho(\mathbf{r}_i)\Delta\mathbf{r} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) \qquad \rho(\mathbf{r}_i)\Delta\mathbf{r} = \frac{1}{N_{xyz}} \sum_{i=1}^{N_{xyz}} \rho_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i)$$

- Convolution

$$4\pi\epsilon_0\varphi(\mathbf{r}_i) = \sum_j G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\rho(\mathbf{r}_j)\Delta\mathbf{r}$$

$$= \frac{1}{N_{xyz}} \sum_{k=1}^{N_{xyz}} G_{\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i)$$

Shifted Green function

- Mirror charge を考慮。Mirror chargeは電子と離れたところにいる。あらかじめある程度の距離を考慮したGreen関数をテーブル化。

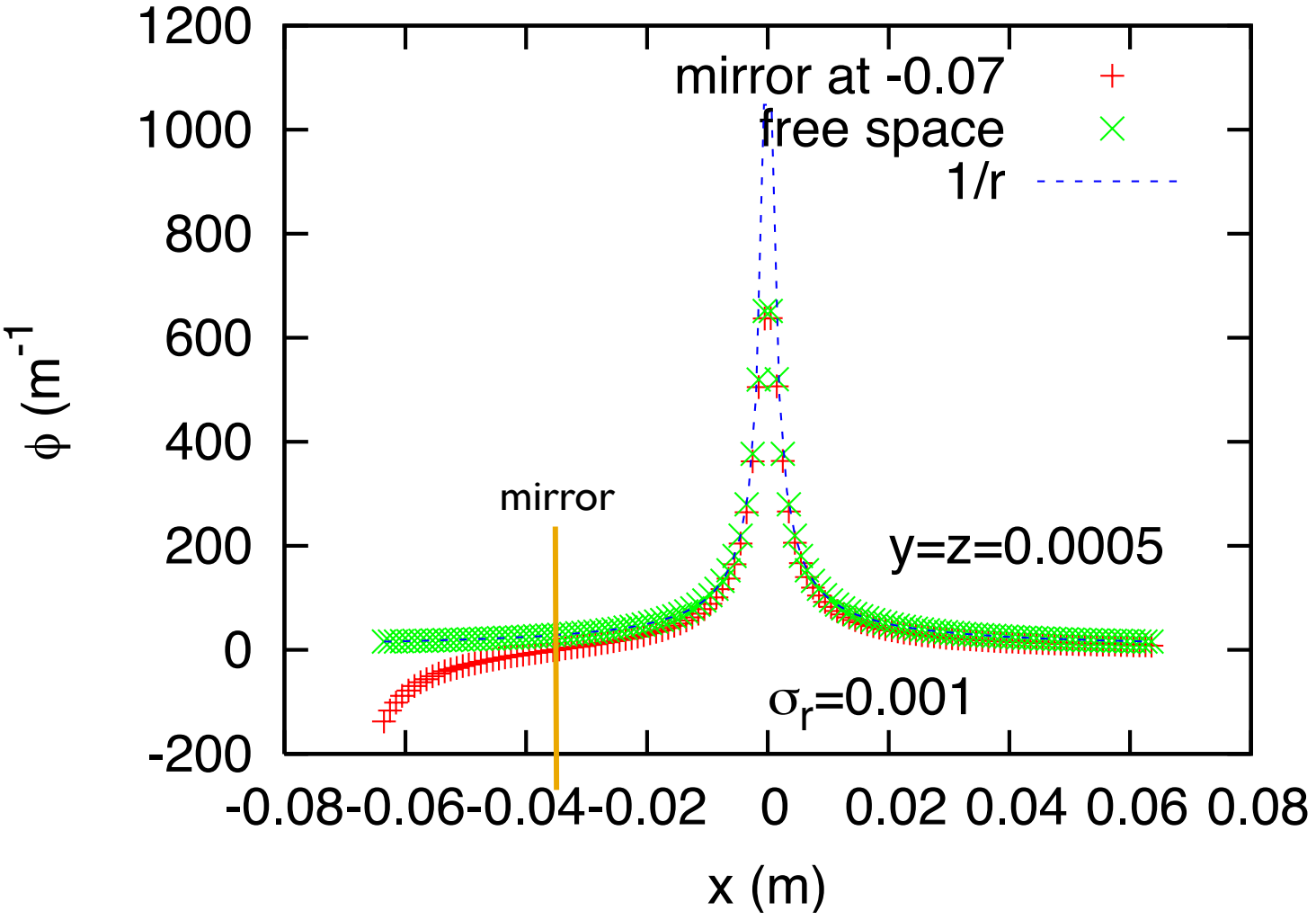
$$G_m(\mathbf{r}) = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}$$

$$G_{i,j,k} = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \int_{x_i - \Delta x/2}^{x_i + \Delta x/2} \int_{y_j - \Delta y/2}^{y_j + \Delta y/2} \int_{z_k - \Delta z/2}^{z_k + \Delta z/2} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_0)^2}} d\mathbf{r}$$

$$\approx \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_0)^2}}$$

Potential of Gaussian Charge distribution with σr=1mm

- Green: Charge distribution in free space
- Red: Charge distribution with mirror at x=0.035



GPGPU

- GPGPU - General Purpose computing on Graphical Processor Unit
- いくつかの実装　　CUDA(NVIDIA) , ATI Stream(ATI), OpenCL
- My machine: Core i7 PC with NVIDIA Tesla 1060 (500k yen).
- NVIDIA Tesla, 240 PU/GPU, 4GB memory

- Tesla performance 0.933TFlops/single precision and 78GFlops/double precision. KEK supercomputer SR11000, 0.13TFlops/Node.

総研大経費で購入

計算アルゴリズム

- 3D particle-particle interaction
- Based on a Demo code: Fast N-Body Simulation with CUDA (L. Nyland, M. Harris, J. Prins, NVIDIA SDK)

$$\mathbf{F}_i = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\sum_{j\neq i}\frac{\mathbf{r}_{ij}}{(|\mathbf{r}_{ij}|^2+\varepsilon^2)^{3/2}} \qquad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$$

-

コーディングのアウトライン

- CPU上での粒子の初期化。
- GPUへ粒子データを送る。
- GPU上で相互作用計算、繰り返し。
- GPUからCPUへデータを引き出す。
- エミッタンス計算等々。

Reference frame

$$H = \sqrt{P^2c^2 + m_0^2c^4} - e\int_0^z E(z')dz'$$

$$\dot{P} = eE(z) \qquad \dot{Z} = \frac{Pc^2}{\sqrt{P^2c^2 + m_0^2c^4}} \qquad P = \frac{m_0V}{\sqrt{1 - V^2/c^2}}$$

- 数値積分

$$P_n = P_{n-1} + eE(z_{n-1})\Delta t \qquad V_n = \frac{P_nc^2}{\sqrt{P_n^2 + m_0^2c^4}}$$

$$Z_n = Z_{n-1} + \frac{P_nc^2}{\sqrt{P_n^2 + m_0^2c^4}}\Delta t$$

Lorentz transformation

$$\mathbf{r} = ...e^{-H_0}e^{-eEz}L(V_2)e^{-\varphi}L^{-1}(V_2)$$
$$e^{-H_0}e^{-eEz}L(V_1)e^{-\varphi}L^{-1}(V_1)$$
$$e^{-H_0}e^{-eEz}e^{-\varphi}\mathbf{r}_0$$

- 静止系でのSpace charge計算の間に以下の変換をする

$$L^{-1}(V_2)e^{-eEz}e^{-H_0}L(V_1)$$

- すなわちreference frameに移り、z, Δtにおける Lorentz収縮、伸長を考慮して、クーロン問題を解く。実験室系に移り加速。

Equation of motion in the reference frame

$$\Delta \mathbf{v}_{i,n} = -n_e r_e c^2 \Delta t \sqrt{1 - V_n^2/c^2} \sum_{j \neq i}^{N_e/n_e} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{(|\mathbf{r}_{ij}|^2 + \varepsilon^2)^{3/2}}$$

n_e : charge in a macro particle

- Particle motion is assumed to be non-relativistic in the reference frame.

Expression of L(V)

- $L^{-1}(V_1)$

$$v_{x,0} = \frac{v_x\sqrt{1-V_1^2/c^2}}{1-V_1 v_z/c^2} \qquad z_0 = \frac{z-V_1 t}{\sqrt{1-V_1^2/c^2}}$$

$$v_{y,0} = \frac{v_y\sqrt{1-V_1^2/c^2}}{1-V_1 v_z/c^2} \qquad t_0 = \frac{t-V_1 z/c^2}{\sqrt{1-V_1^2/c^2}}$$

$$v_{z,0} = \frac{v_z - V_1}{1-V_1 v_z/c^2} \qquad \Delta t_0 = \Delta t\sqrt{1-V_1^2/c^2}$$

- $e^{-e\int \mathbf{E}d\mathbf{r}} e^{-H_0}$

- $L(V_2)$

$$v_x = \frac{v_{x,0}\sqrt{1-V_2^2/c^2}}{1+V_2 v_{z,0}/c^2} \qquad z = \frac{z_0+V_2 t_0}{\sqrt{1-V_2^2/c^2}}$$

$$v_y = \frac{v_{y,0}\sqrt{1-V_2^2/c^2}}{1+V_2 v_{z,0}/c^2} \qquad t = \frac{t_0+V_2 z_0/c^2}{\sqrt{1-V_2^2/c^2}}$$

$$v_z = \frac{v_{z,0}+V_2}{1+V_2 v_{z,0}/c^2}$$

加速

$$H = \underbrace{\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m_0^2c^4}}_{\mathsf{H_0}} - e\int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{E}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$$

- 数値積分

$$\mathbf{p}_n = \mathbf{p}_{n-1} + e\mathbf{E}(\mathbf{r}_{n-1})\Delta t$$

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_{n-1} + \frac{\mathbf{p}_n c^2}{\sqrt{\mathbf{p}_n^2c^2 + m_0^2c^4}}\Delta t$$

計算時間

- NVIDIA-Tesla: 30,000粒子の計算(ミラー電荷、ローレンツ変換無一重力問題と同じ）では400GFlops、0.042 sec/step.
- ミラー電荷、ローレンツ変換を加えると、100,000粒子で0.67sec/step (ミラーとN^2効果)
- Hitachi SR11000(KEK-SystemA), 3D-PIC　100,000粒子 0.15 sec/step (時間はメッシュで決まり粒子数によらない)
- Blue Gene(KEK-SystemB)はこの種の計算に向かない。