

Суперкомпьютерное моделирование релятивистских течений газа: задачи, вызовы и результаты

Куликов Игорь

д.ф.-м.н., в.н.с.

Лаборатория суперкомпьютерного
моделирования ИВМиМГ СО РАН

2 ноября 2023 года



Научный коллектив с 2003 года



Лазарева Г.Г.



Вшивков В.А.



Годунов С.К.



Тутуков А.В.



Глинский Б.М.



Сапетина А.Ф.



Воробьев Э.И.



Куликов И.М.



Черных И.Г.

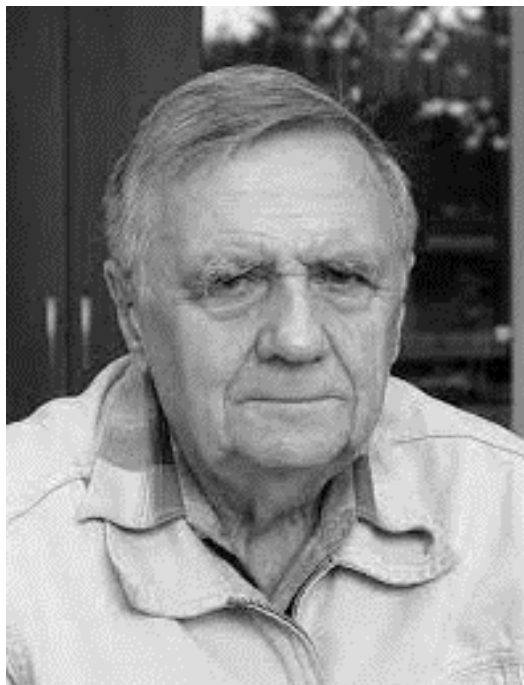


Элбакян В.Г.



Караваев Д.А, Пригарин В.Г., Ульяничев И.С., Завьялов О.Р.

Вечная память
Годунову Сергею Константиновичу и
Глинскому Борису Михайловичу



**Годунов Сергей
Константинович**
17.07.1929 – 15.07.2023



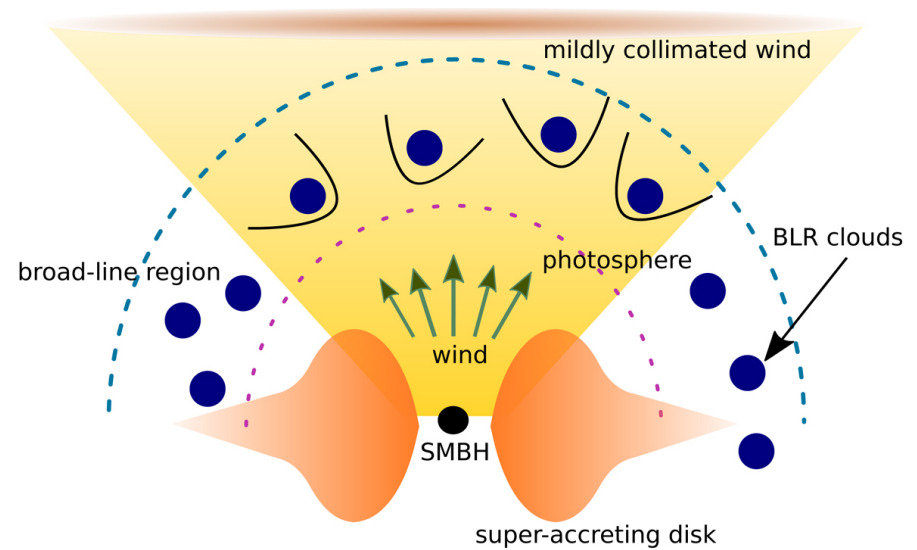
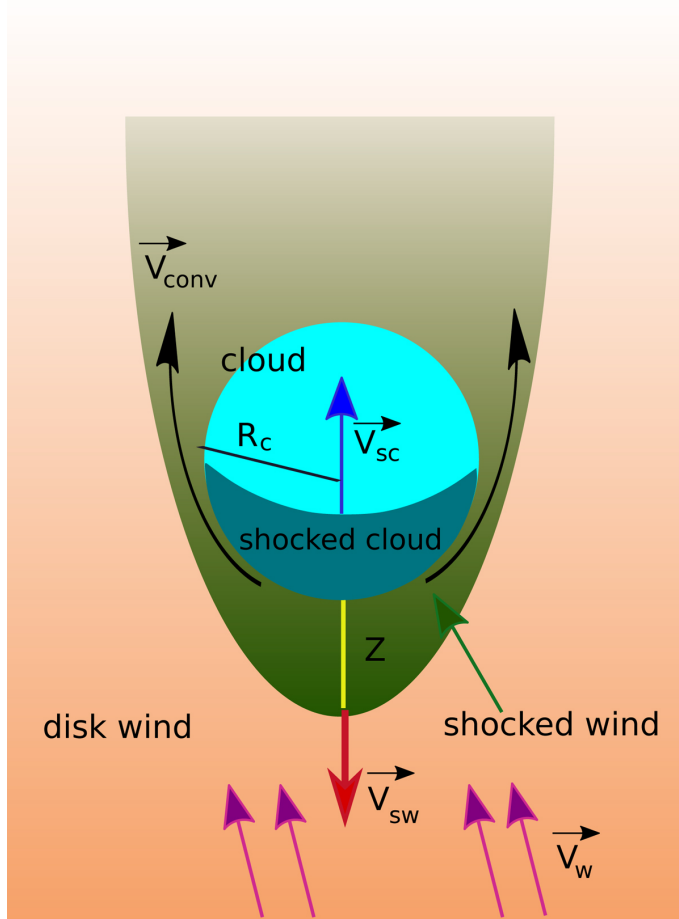
**Глинский Борис
Михайлович**
15.05.1940 – 29.07.2023

Вселенная – гидродинамика высоких энергий со множеством взаимодействий



Взаимодействие релятивистских струй с молекулярными облаками

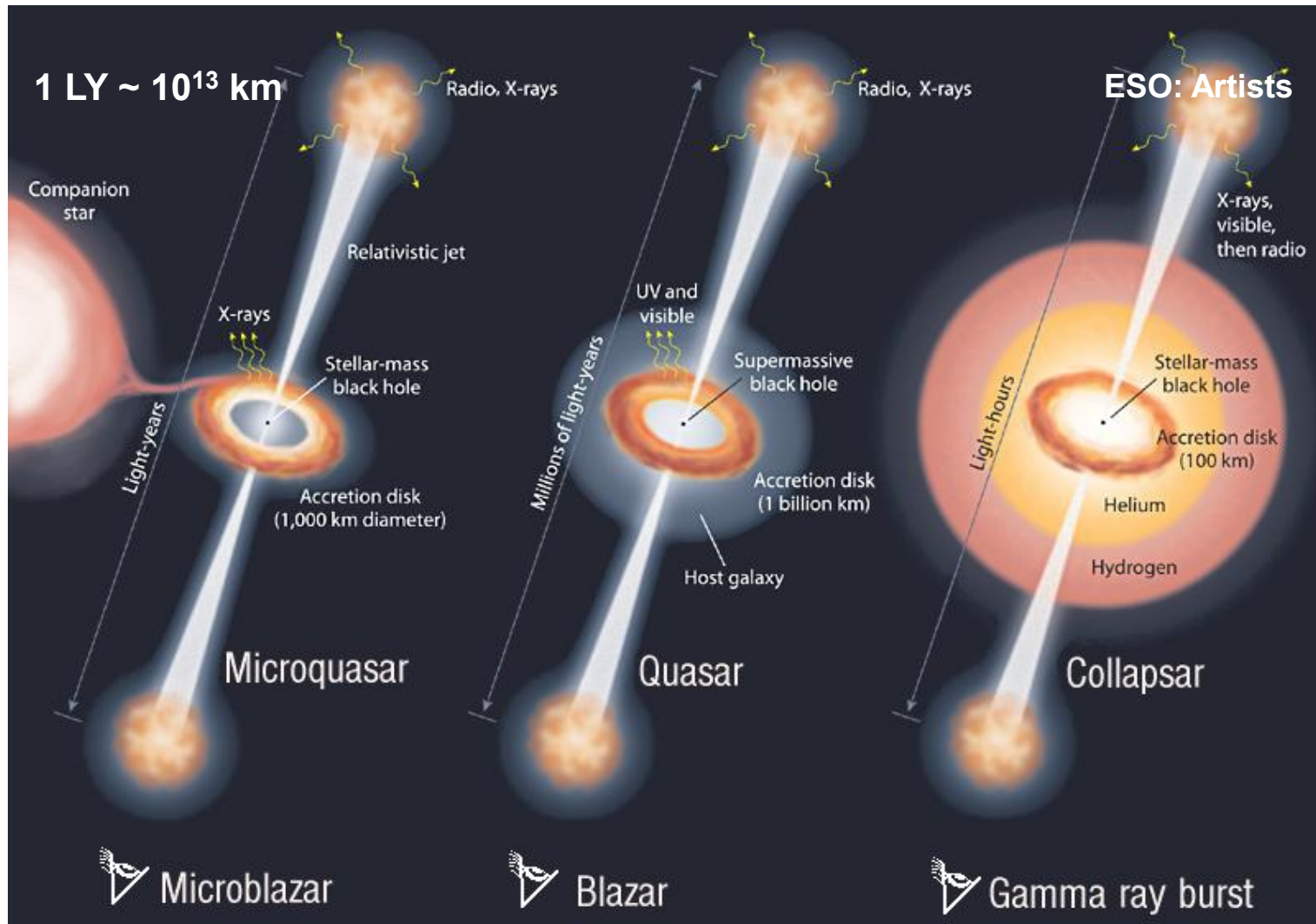
Gustavo Esteban Romero (IAR, Ла Плата, Аргентина)



Sotomayor P., Romero G.E. Nonthermal radiation from the central region of super-accreting active galactic nuclei
 // *Astronomy & Astrophysics.* – 2022. – V. 664. – Article Number A178

Формирование релятивистских джетов

Igor Felix Mirabel (IAFE, Буэнос Айрес, Аргентина)



Релятивистская гидродинамика

Название	Методика	Контроль	Технологии
CAFE	WENO + HLLE	Нет	MPI
PLUTO	PPM + HLL	$E = mc^2$	MPI
RAM	WENO + AMR + HLL	Нет	MPI
RAMSES	PLM + MUSCL + AMR	$E = mc^2$	MPI
CRONOS	PLM + MUSCL	Энтропия	MPI
GENESIS	PLM + Roe	$E = mc^2$	MPI
TESS	Voronoi 2D + HLLC	Нет	MPI + OpenMP

**Проблема гиперболичности уравнений
релятивистской гидродинамики**

Методы решения уравнений гидродинамики

Гидродинамические модели

HD

MHD

SRHD

SRMHD

SubGrid



Схемы решения задачи Римана

Годунов

Рое

HLLE/C/D

Русанов

Матрица
вязкости



Кусочно-полиномиальные реконструкции

Схема Колгана

Параболическая

Кубическая

Решение уравнений гидродинамики

Законы сохранения

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (f(q)) = 0$$



Линеаризация

$$\frac{\partial q}{\partial t} + a \frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

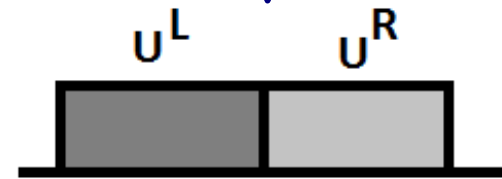


$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \left(q + \frac{f}{a} \right) + a \frac{\partial}{\partial x} \left(q + \frac{f}{a} \right) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(q - \frac{f}{a} \right) - a \frac{\partial}{\partial x} \left(q - \frac{f}{a} \right) = 0 \end{cases}$$



Метод Годунова

$$\underbrace{\frac{q_k^{n+1} - q_k^n}{\tau}}_{U^L} + \underbrace{\frac{F_{k+1/2} - F_{k-1/2}}{h}}_{U^R} = 0$$



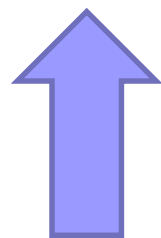
$$\underbrace{q_L + \frac{f_L}{a} = Q + \frac{F}{a} \quad q_R - \frac{f_R}{a} = Q - \frac{F}{a}}_{}$$

$$F = \frac{f_L + f_R}{2} + \frac{a}{2} (q_L - q_R)$$

Решение задачи Римана

$$F = \frac{f_L + f_R}{2} + \frac{a}{2}(q_L - q_R) \quad \xrightarrow[\text{форма}]{\text{Векторная}} \quad F = \frac{F_L + F_R}{2} + \frac{\mathfrak{I}(q)}{2}(Q_L - Q_R)$$

$$F = \frac{F(-\lambda\tau) + F(\lambda\tau)}{2} + \frac{\mathfrak{I}(q)}{2} \times (Q(-\lambda\tau) - Q(\lambda\tau))$$



Кусочно-полиномиальная реконструкция

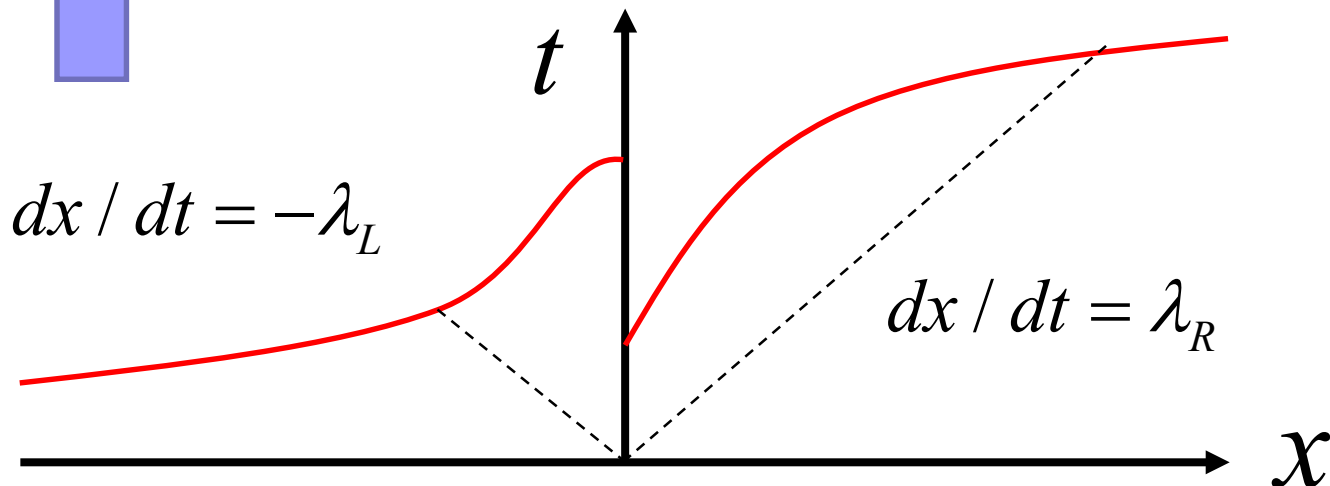


Схема типа Лакса-Фридрихса

Принцип максимума для параболических уравнений (!)

**Достигается на границе области
или в начальных данных**

**Физическое ограничения скорости
скоростью света $|v| \leq c = 1$**

$$F_{k \pm 1/2} = \frac{F(-\lambda\tau) + F(\lambda\tau)}{2} + \frac{\mathfrak{I}(q)}{2} \times (q(-\lambda\tau) - q(\lambda\tau))$$



$$F_{k \pm 1/2} = \frac{F(-\lambda\tau) + F(\lambda\tau)}{2} + \frac{1}{2} \times (q(-\lambda\tau) - q(\lambda\tau))$$

Методы решения уравнений гидродинамики

Гидродинамические модели

HD

MHD

SRHD

SRMHD

SubGrid

Схемы решения задачи Римана

Годунов

Рое

HLLE/C/D

Русанов

Матрица
вязкости

Кусочно-полиномиальные реконструкции

Схема Колгана

Параболическая

Кубическая

Регуляризация

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Gamma \rho \\ \Gamma^2 \rho h \vec{u} \\ \Gamma^2 \rho h - p \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \Gamma \rho \vec{u} \\ \Gamma^2 \rho h \vec{u} \vec{u} - p \\ \Gamma^2 \rho h \vec{u} \end{pmatrix} = 0$$

$$h = 1 + \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho}$$

$$\Gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - u^2}}$$

I. Уравнение для релятивистской энтропии

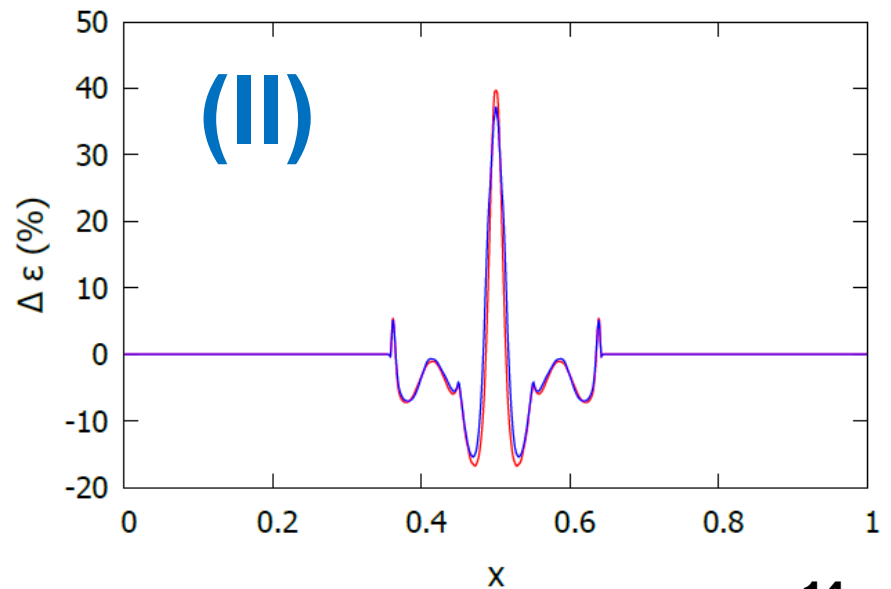
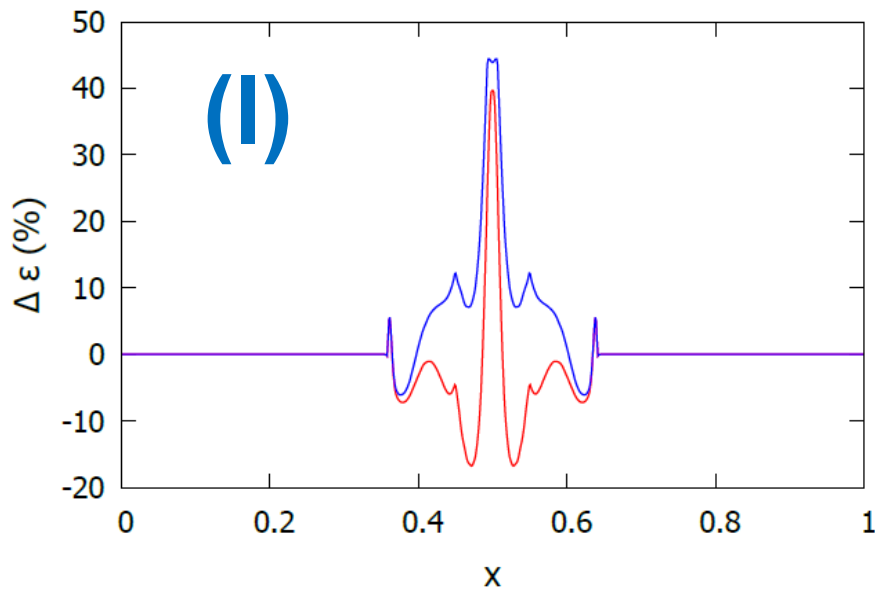
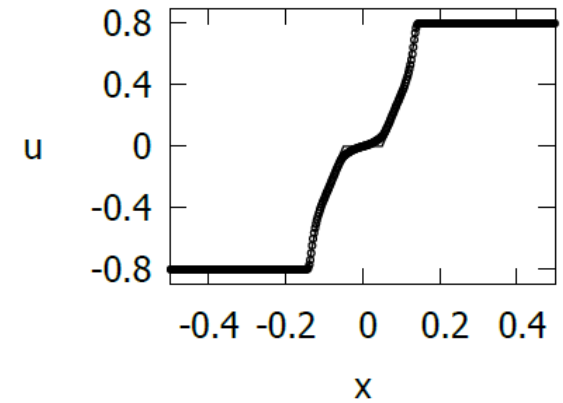
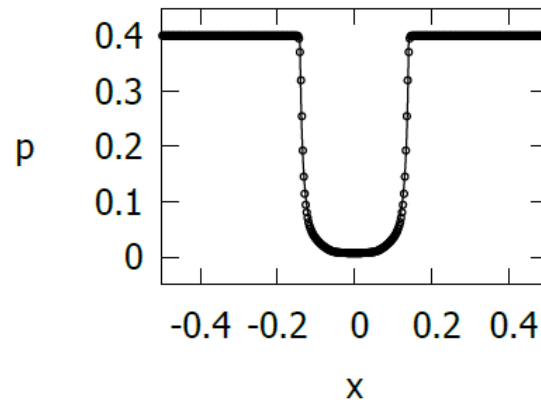
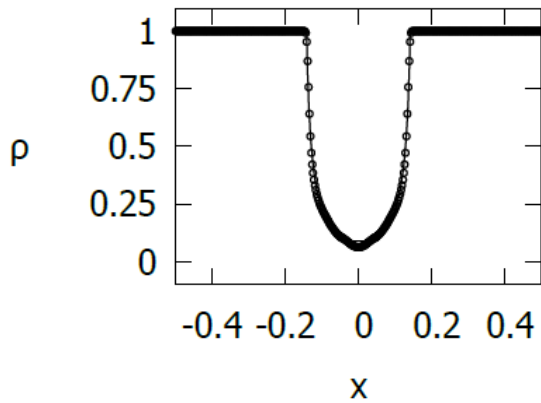
$$\frac{\partial}{\partial t} (\Gamma \sigma \rho) + \nabla \cdot (\Gamma \sigma \rho \vec{u}) = 0$$

II. Эквивалентность энергии и массы

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Gamma^2 \rho h - p - \Gamma \rho) + \nabla \cdot (\Gamma^2 \rho h \vec{u} - \Gamma \rho \vec{u}) = 0$$

Регуляризация

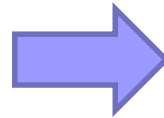
Релятивистский тест Эйнфельдта



Гиперболичность уравнений

Законы сохранения

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (f(q)) = 0$$



Законы сохранения

$$\frac{\partial L_u}{\partial t} + \nabla \cdot M_u = 0$$

Физические переменные

$$u = \psi^{-1}(q)$$

$$L_{uu} \frac{\partial u}{\partial t} + M_{uu} \nabla u = 0$$

Термодинамические
потенциалы

$$L = L(u) \quad M = M(u)$$

Условие
гиперболичности

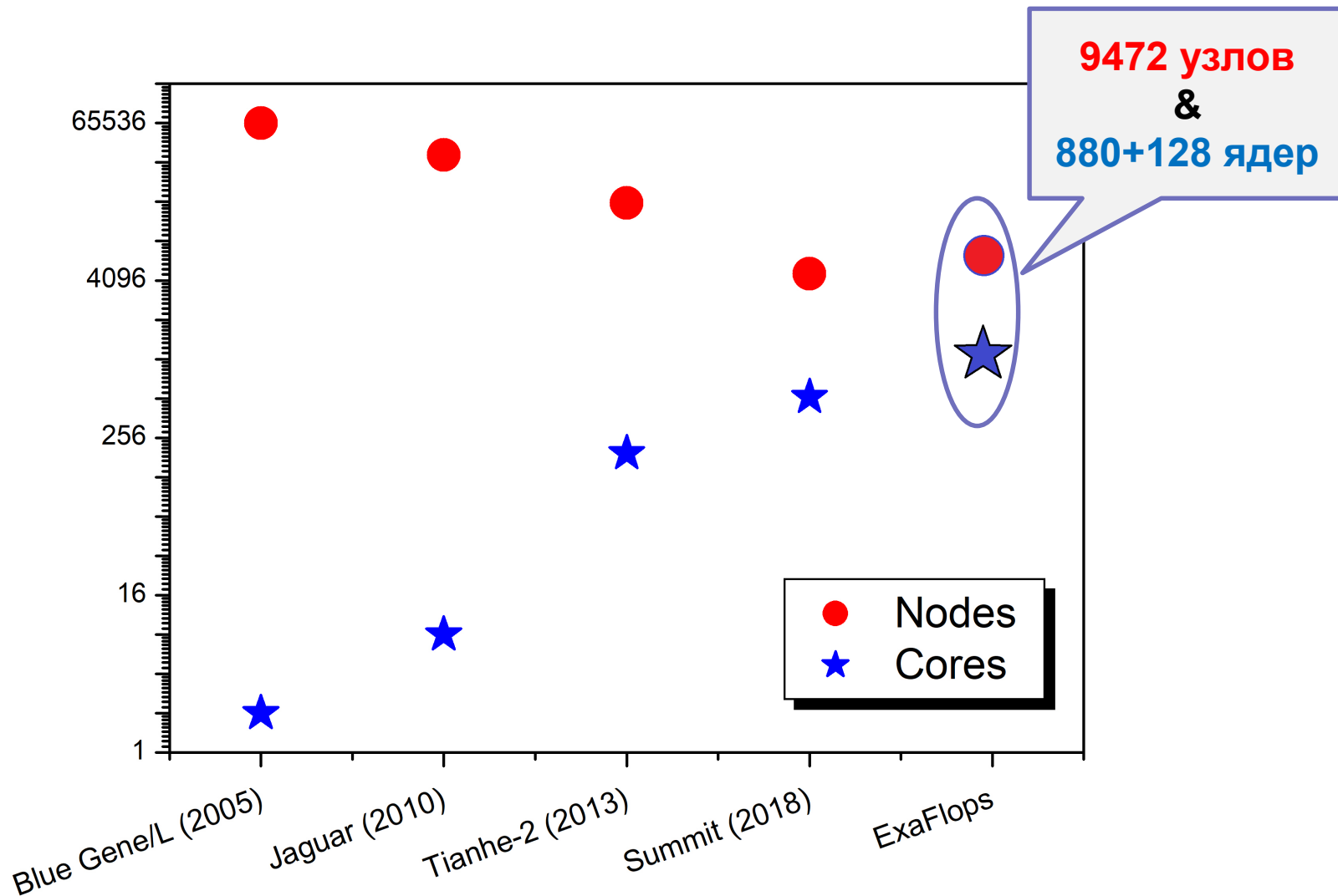
$$L_{uu} > 0$$

**Вопрос о гиперболичности уравнений
релятивистской гидродинамики открыт**

Топ 10 (июнь, 2023)

1. Frontier - AMD 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, HPE
2. Supercomputer Fugaku - A64FX 48C 2.2GHz, Fujitsu
3. LUMI - AMD 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, HPE
4. Leonardo - Intel Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100, Atos
5. Summit - IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, IBM
6. Sierra - IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, IBM/NVIDIA
7. Sunway TaihuLight - Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway
8. Perlmutter - AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, NVIDIA A100, HPE
9. Selene - AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, NVIDIA
10. Tianhe-2A - Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, Matrix-2000, Inspur

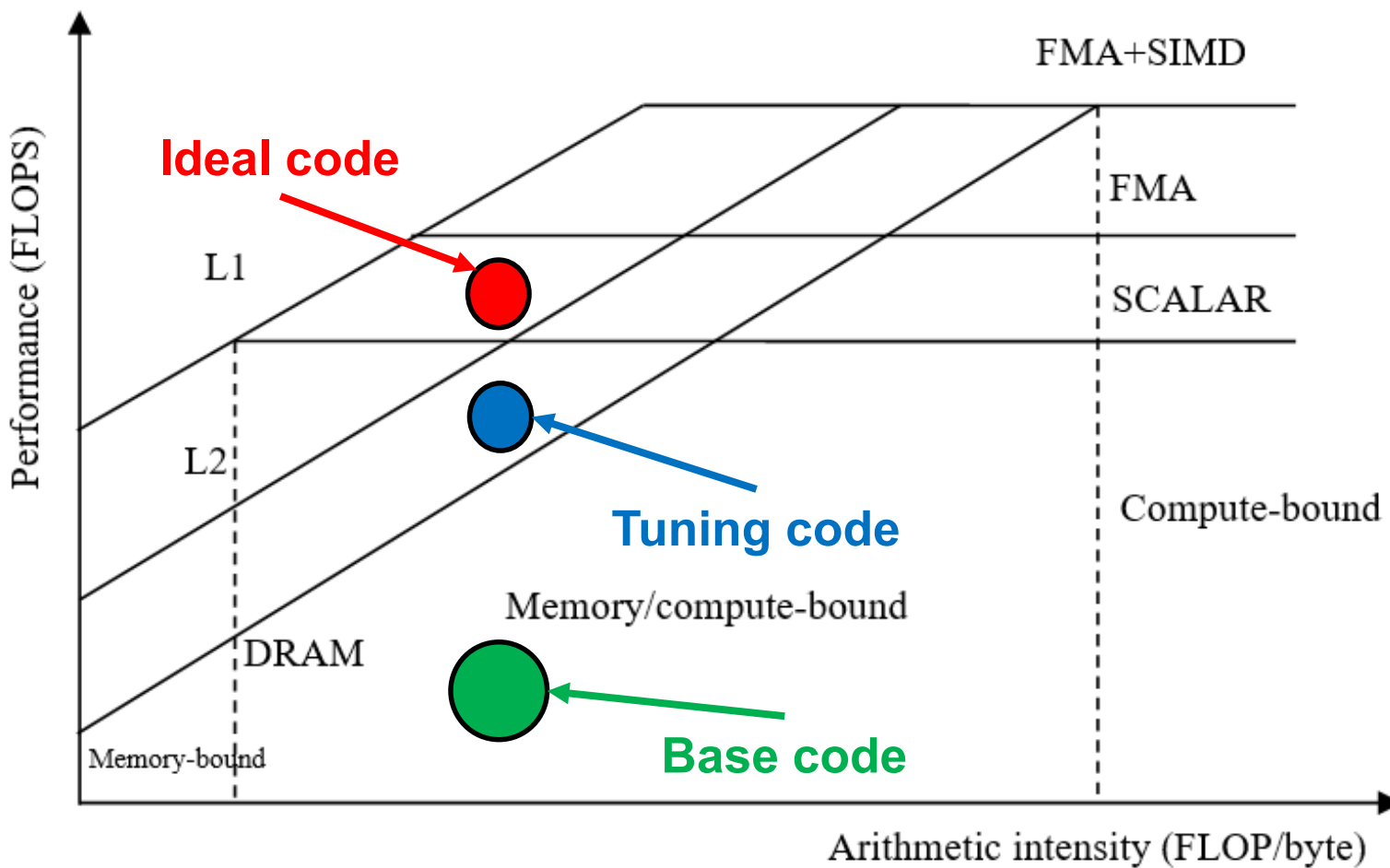
Архитектура суперЭВМ



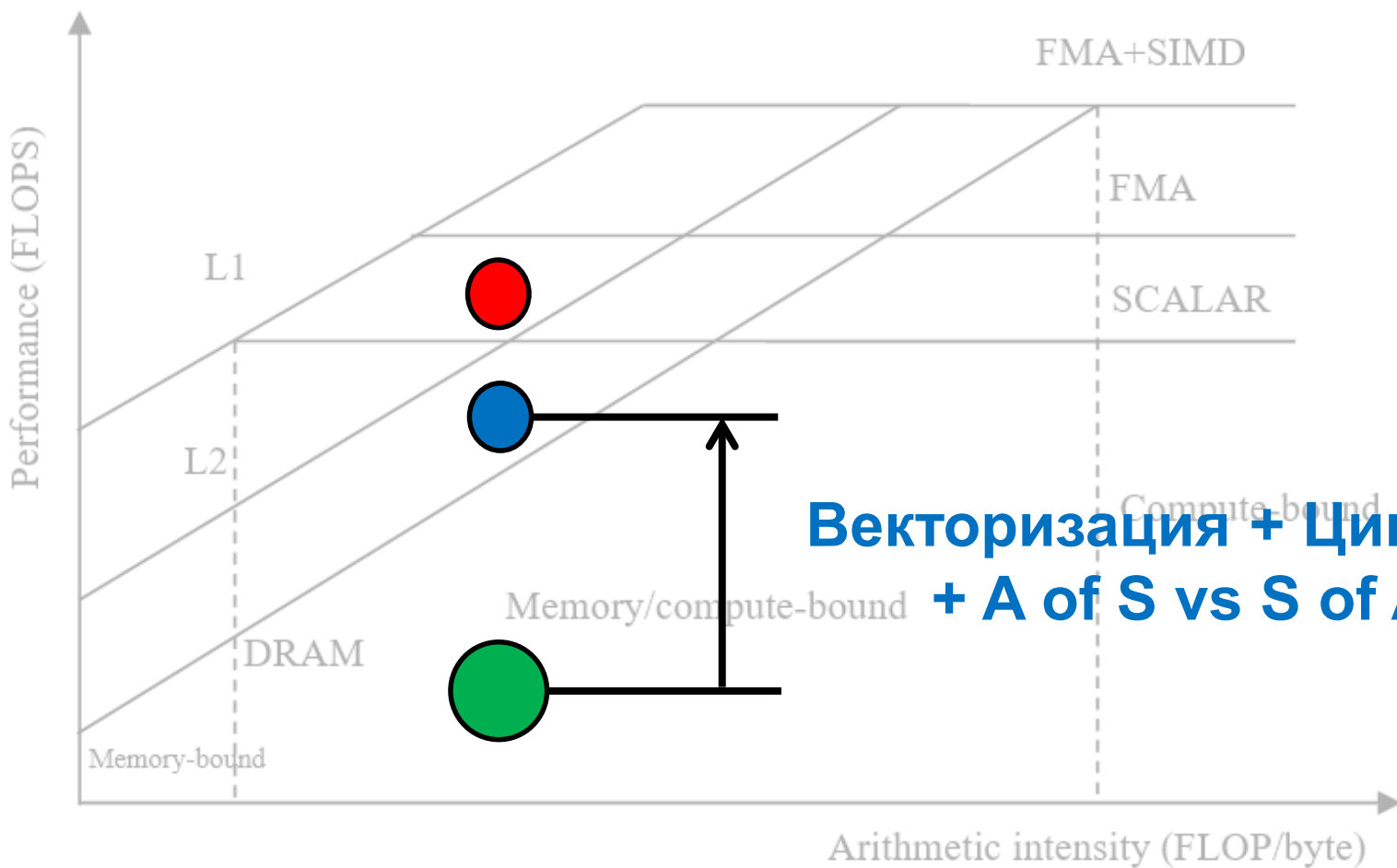
Стратегия разработки кодов

- Оптимизация работы с кэшем
- Векторизация вычислений
- Расширение OpenMP на GPU
- Минимум процессов
- Максимум потоков в процессе
- Коды уровня “**language only**”

Производительность в рамках узла

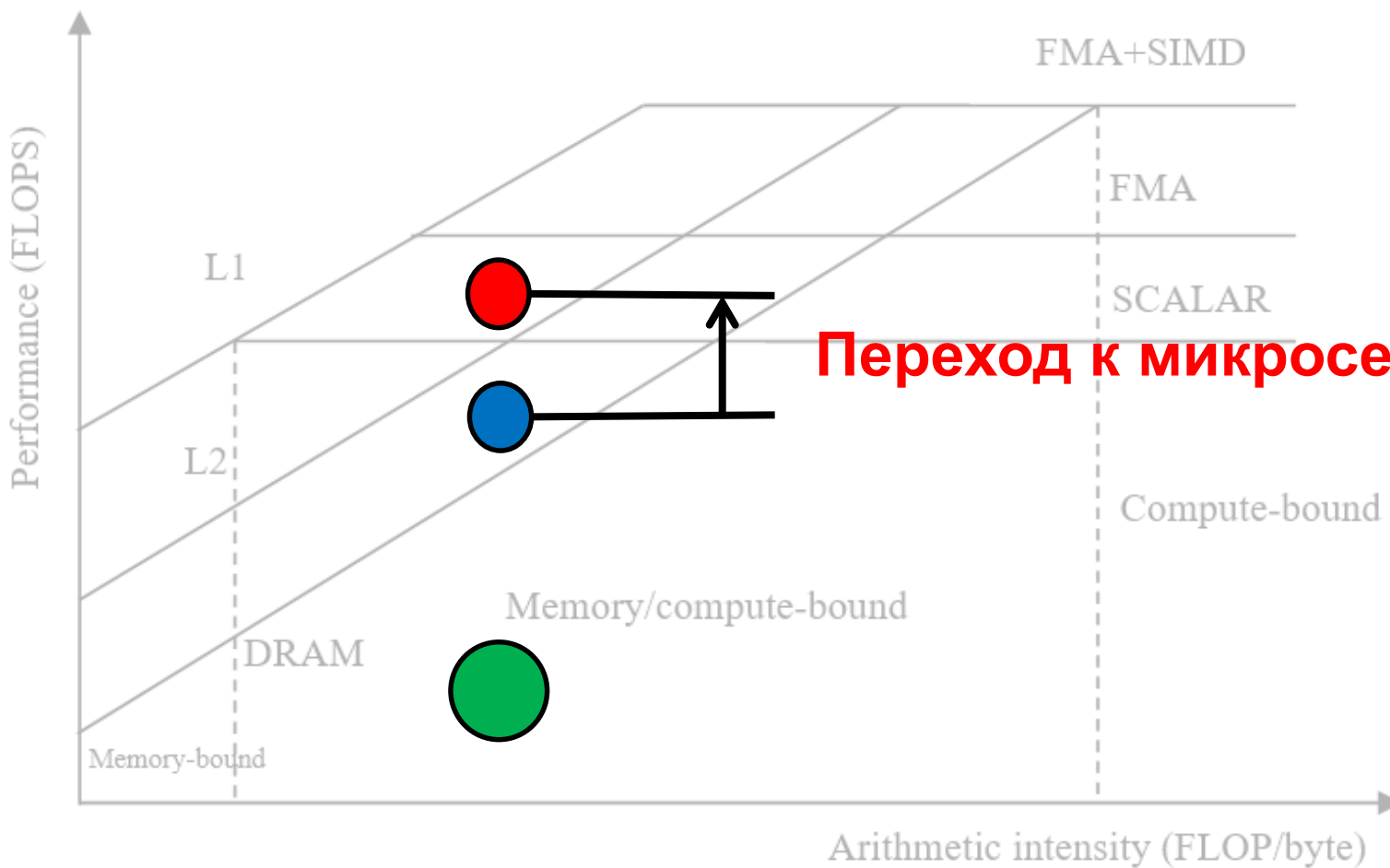


Производительность в рамках узла



**Векторизация + Циклы +
+ A of S vs S of A**

Производительность в рамках узла



От CUDA к OpenMP

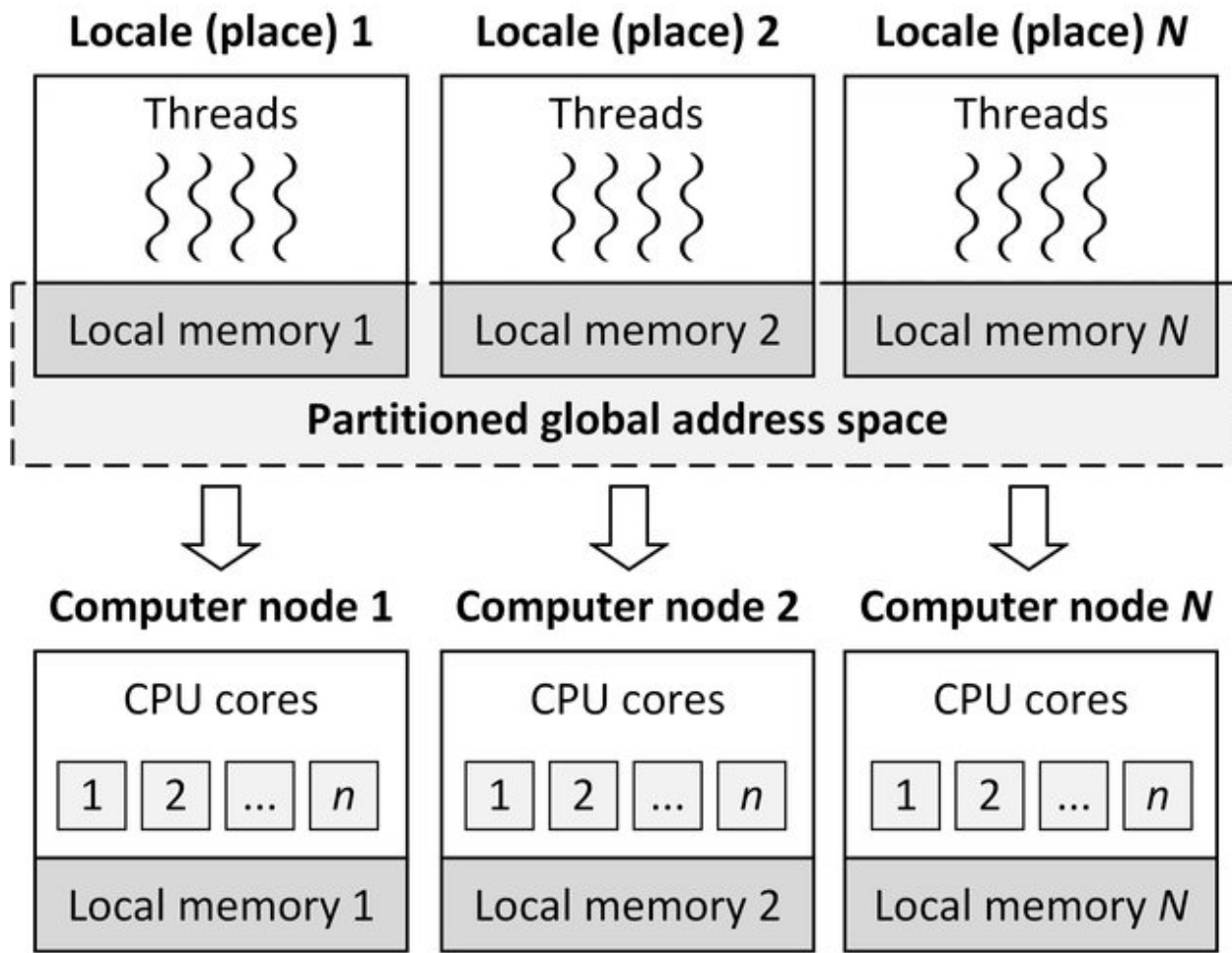
```
#pragma omp target parallel for reduction(+:dot) map(to: a,b)
for (int i = 0; i < N; i++)
    dot = dot + a[i] * b[i];
```

AstroPhi код для Intel Xeon Phi

```
#pragma offload target (mic) in(a:length(N), b:length(N))
{
    #pragma omp parallel for reduction(+:dot)
    for (int i = 0; i < N; i++)
        dot = dot + a[i] * b[i];
}
```

Kulikov I.M., Chernykh I.G., Snytnikov A.V., Glinskiy B.M., Tutukov A.V.
AstroPhi: A code for complex simulation of dynamics of astrophysical
objects using hybrid supercomputers // **Computer Physics
Communications.** - 2015. - V. 186. - P. 71-80.

Partitioned Global Address Space



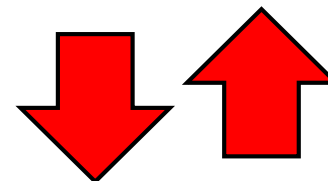
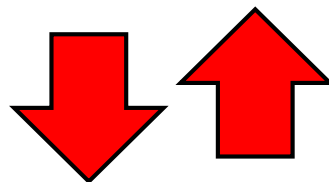
Реализация PGAS

- Coarray Fortran (**стандарт Фортран 2008**)
- Unified Parallel C (диалект стандарта ISO C)
- Chapel (параллельный язык Cray)
- X10 (параллельный язык IBM)
- Fortress (параллельный язык Sun)
- UPC++ (библиотека шаблонов)
 - Remote Memory Access
 - Remote Procedure Call
- Global Arrays (библиотека)

Обзор использования Coarray Fortran

- **Reshetova, Cheverda & Khachkova, LNCS 2019**
 - CAF имеет не хуже производительность MPI и MPI+OpenMP при большом числе процессов
- **Reshetova, Cheverda & Khachkova, CCIS 2019**
 - CAF значительно проще в использовании, чем технология MPI в различных вариантах коммуникаций
- **Reshetova, Cheverda & Koinov, CCIS 2022**
 - CAF не хуже по производительности сочетания функций MPI_Isend/MPI_Irecv
- **Garain, Balsara & Reid, JCompPhys 2015**
 - CAF эквивалентна по производительности MPI 3.0
- **Shterenlikht & Cebamanos, Parallel Computing 2019**
 - Масштабируемость до 100 000 процессов

Использование Coarray Fortran



```
irank = this_image()  
isize = num_images()
```

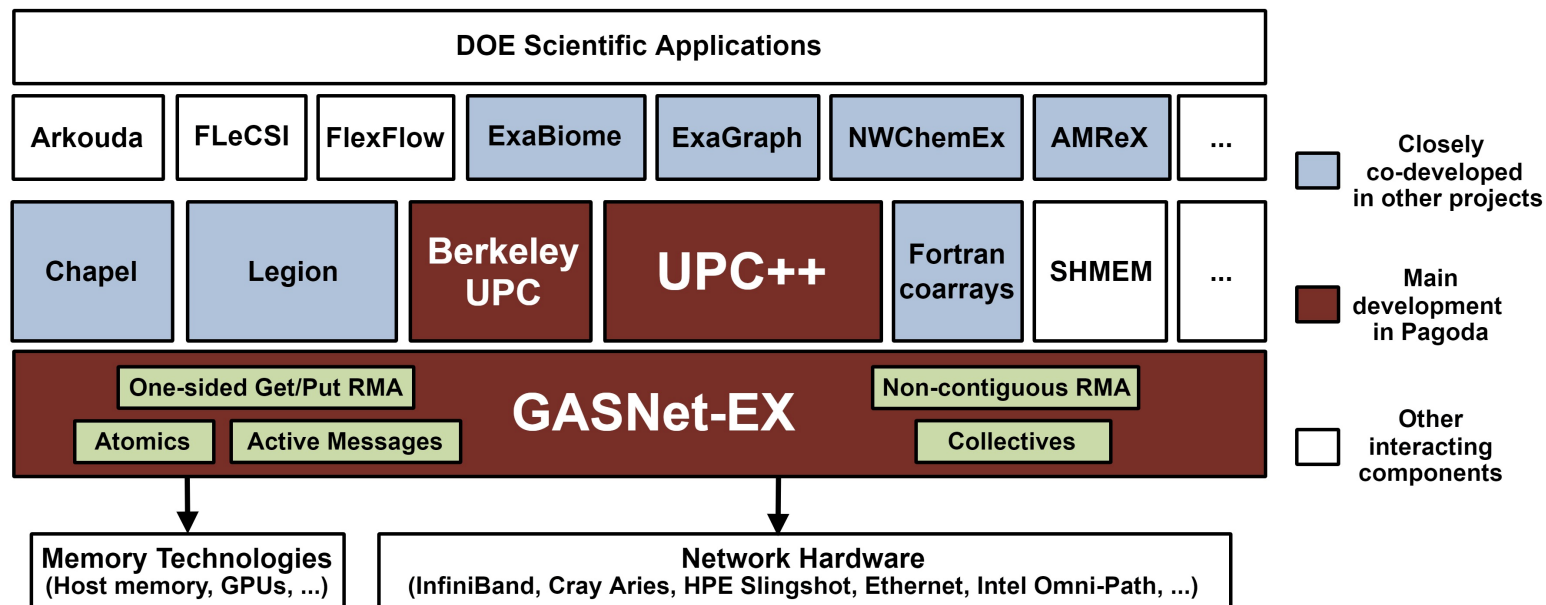
```
if(irank < isize) then  
  A(1)[irank+1] = A(Nlocal+1)  
  A(Nlocal+2) = A(2)[irank+1]  
endif
```

```
sync all
```

А ушли ли мы от MPI?

В компиляторе Intel используются технологии MPI 3.0 для реализации Coarray Fortran операций, но в части компиляторов GNU Fortran и OpenUH используется технология GASNet

Технология GASNet как альтернатива MPI



Сильная и слабая масштабируемость

Ускорение 3D кода в рамках узла НКС-1П ССКЦ:

18x CAF

VS.

18x OpenMP

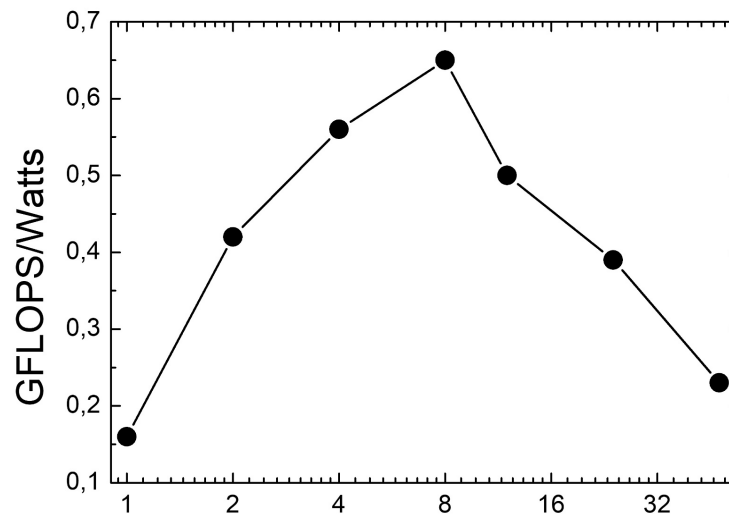
Эффективность 3D кода на 192 ядрах:

92% CAF

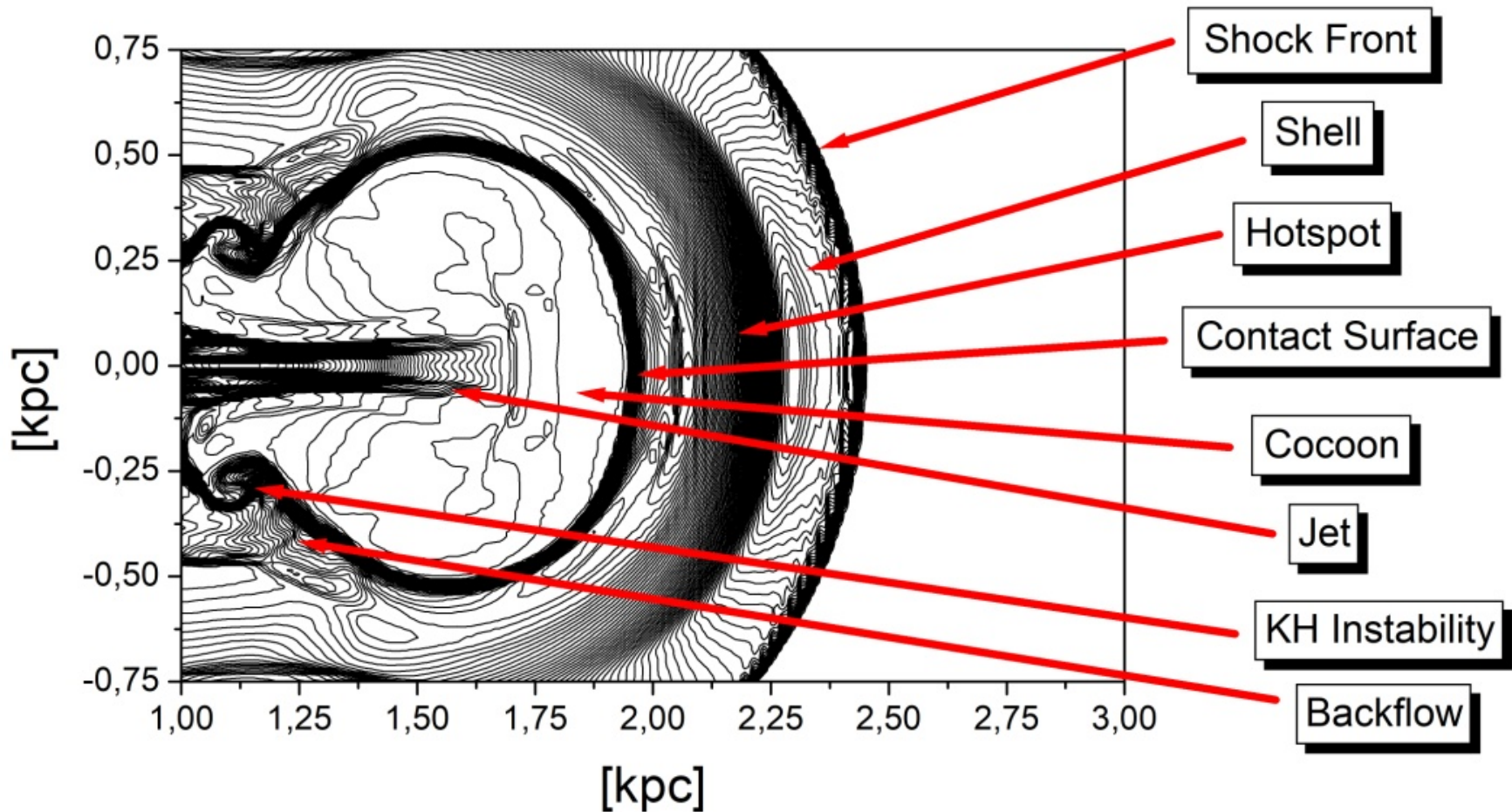
VS.

92% MPI

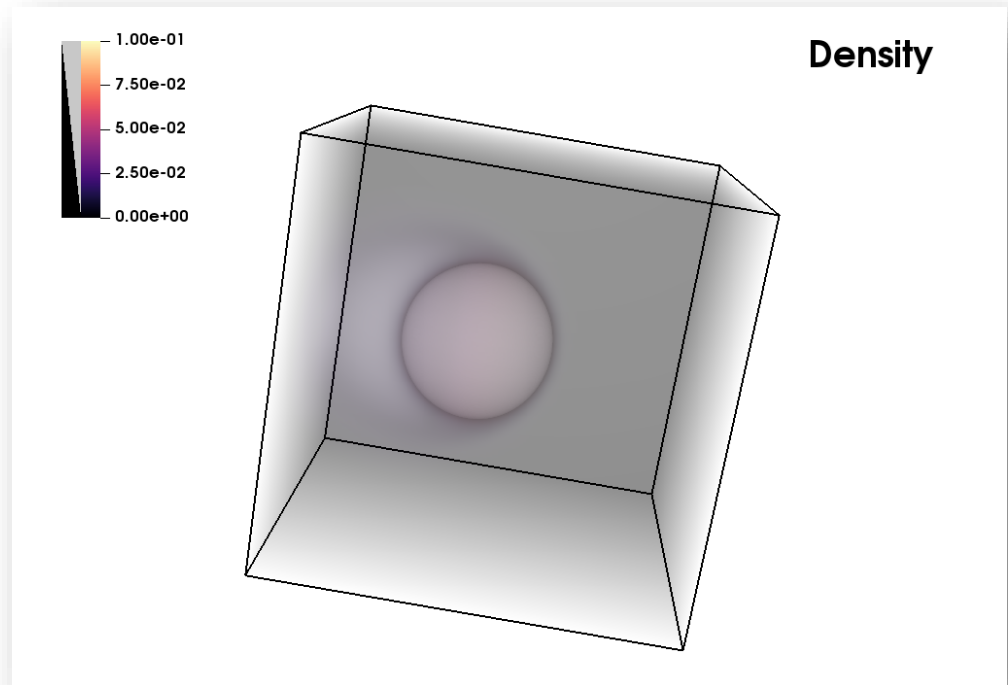
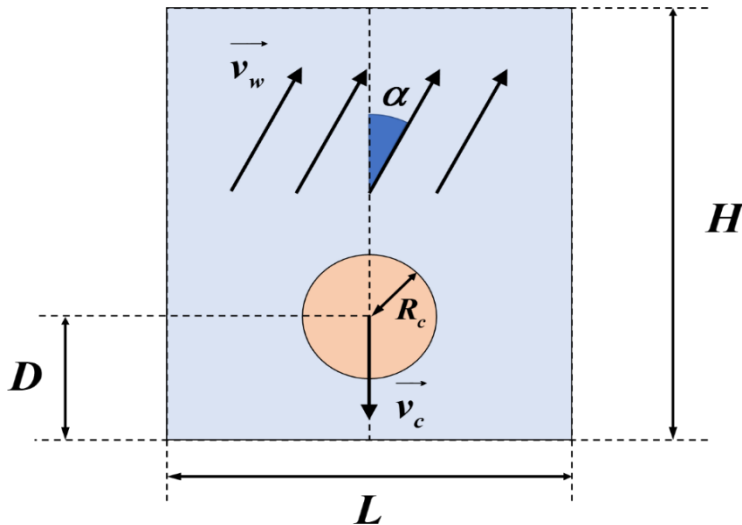
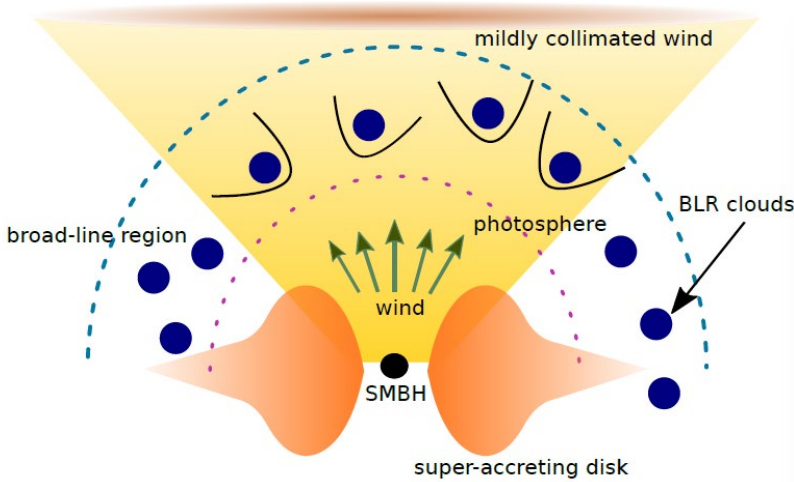
**Оптимальная
энергоэффективность
достигается при
использовании 8 ядер
на узел на кластере
НКС-1П ССКЦ**



Эволюция релятивистских джетов



Взаимодействие релятивистских струй с молекулярными облаками



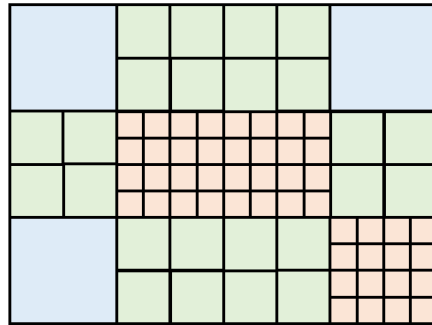
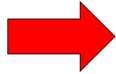
Kulikov I., Chernykh I., Karavaev D., Zavyalov O., Elbakyan V., Abaroa L., Romero G. The Partitioned Global Address Space Parallel Code for Numerical Modeling in Special Relativistic Hydrodynamics // [The Astrophysical Journal Supplement Series.](#) – submitted at December 1, 2023.

Адаптивные сетки на основе микросеток (Adaptive Mesh Refinement)

Логическая структура адаптивных сеток

1	2	2	1
2	4	4	2
1	2	2	4

The Plan of Mesh

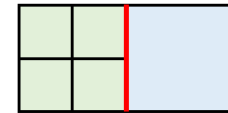


The Mesh Configuration

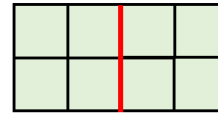
(1) Boundary Condition



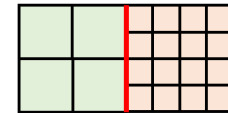
(3) Big Micro Mesh



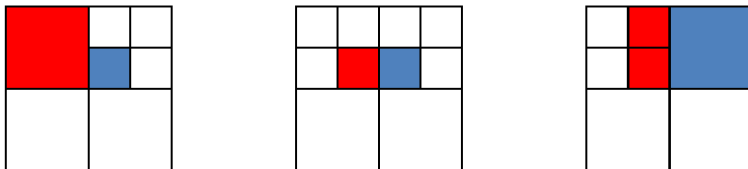
(2) Equal Micro Mesh



(4) Small Micro Mesh

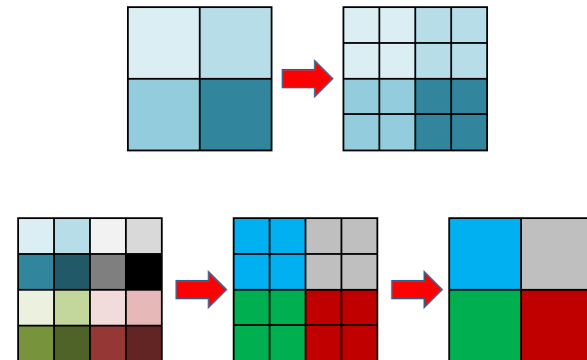


Решение задачи Римана



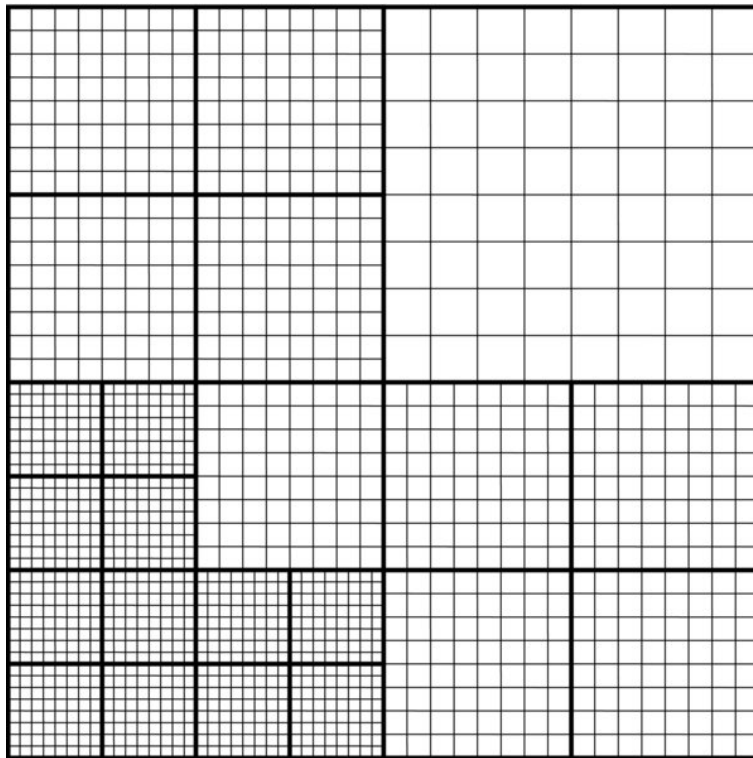
В основе авторского AMR лежит микросетка

Перестройка сетки

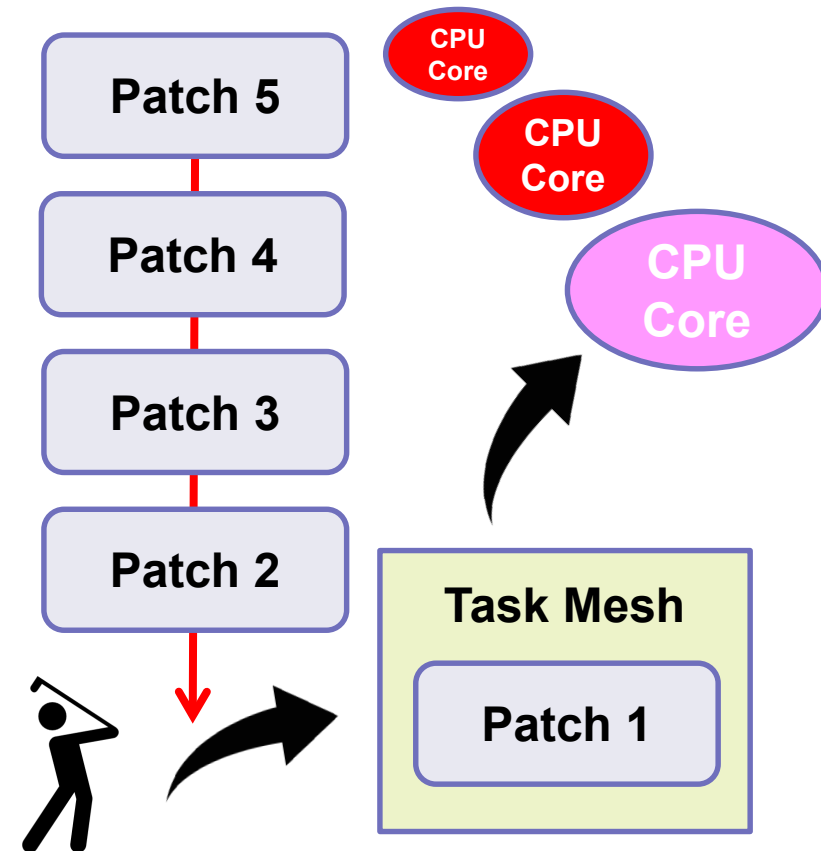


Адаптивные сетки на основе микросеток (Adaptive Mesh Refinement)

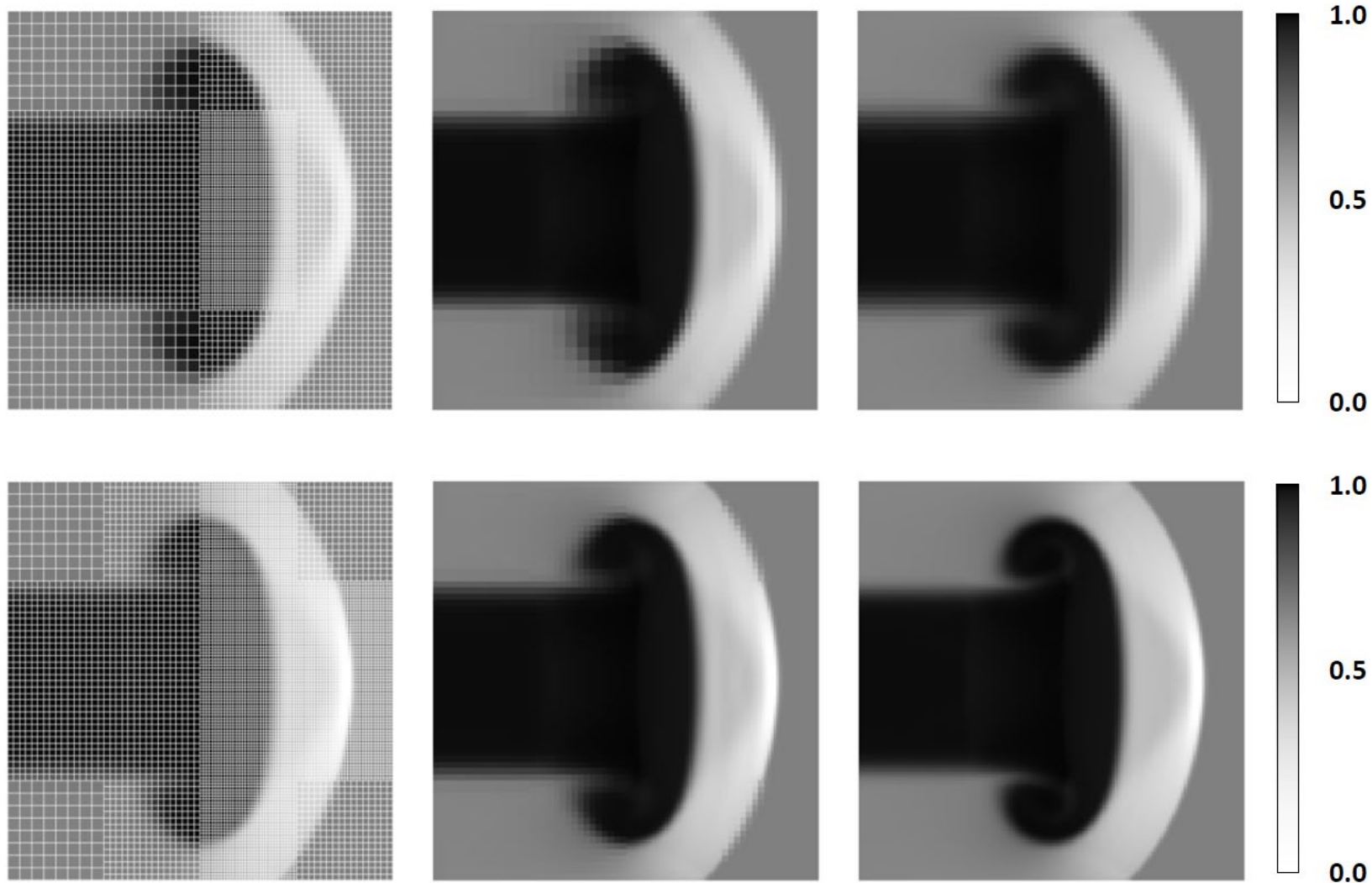
Patch-Block-Structured Adaptive-Mesh-Refinement Relativistic Hydrodynamics



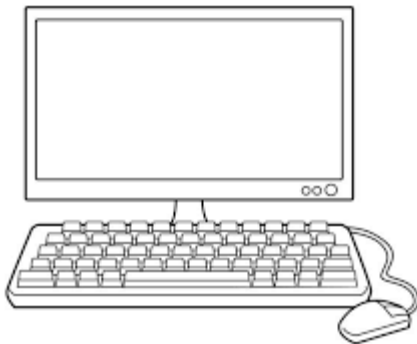
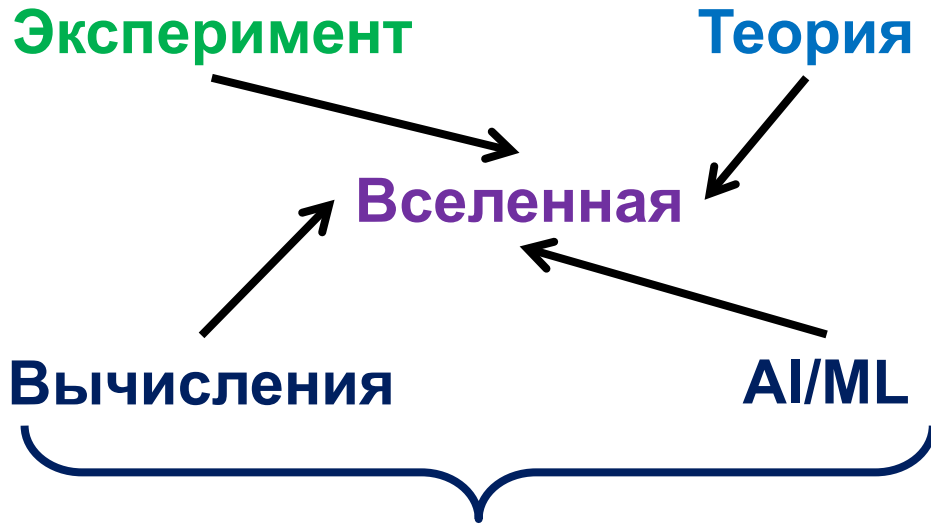
Task-Based Execution Model



Эволюция релятивистских джетов

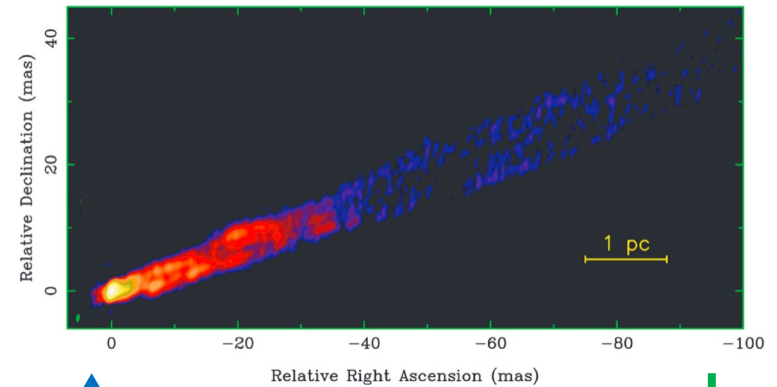


О машинном обучении



Суперкомпьютер

Наблюдения



↑
Прямое
моделирование

↓
Ретроспективная
обратная задача

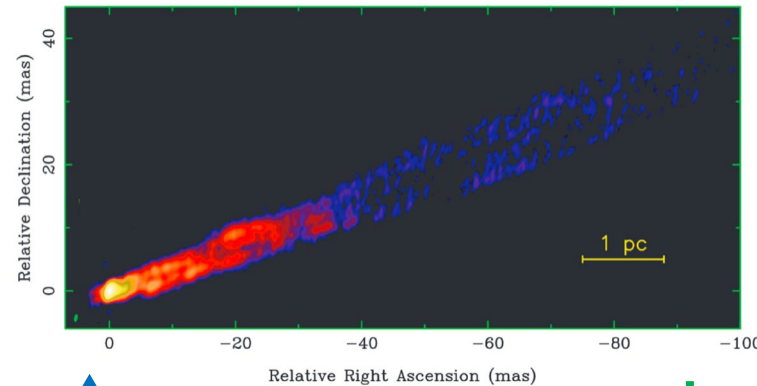
Начальные условия $(\rho, u, p)_{t=0}$

О машинном обучении

**Вычисления
имеют
потенциально
бесконечную
точность**

Наблюдения

**AI/ML имеют
неустранимую
ошибку
первого рода**



Вычисления

~~AI/ML~~



**Прямое
моделирование**



**Вычисления
&
AI/ML**

**Ретроспективная
обратная задача**

**Начальные
условия $(\rho, u, p)_{t=0}$**

Публикации

[1] Kulikov I., Chernykh I., Karavaev D., Prigarin V., Sapetina A., Ulyanichev I., Zavyalov O. A New Parallel Code Based on a Simple Piecewise Parabolic Method for Numerical Modeling of Colliding Flows in Relativistic Hydrodynamics // **Mathematics**. – 2022. – V. 10 (11). – Article Number 1865.

[2] Kulikov I. A new code for the numerical simulation of relativistic flows on supercomputers by means of a low-dissipation scheme // **Computer Physics Communications**. – 2020. – V. 257. – Article Number 107532.

[3] Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A. A new hydrodynamic code with explicit vectorization instructions optimizations, dedicated to the numerical simulation of astrophysical gas flow. I. Numerical method, tests and model problems // **The Astrophysical Journal Supplement Series**. – 2019. – V. 243. – Article Number 4.

[4] Akimova E., Misilov V., Kulikov I., Chernykh I. OMPEGAS: Optimized Relativistic Code for Multicore Architecture // **Mathematics**. – 2022. – V. 10 (11). – Article Number 2546.

[5] Kulikov I. Using Adaptive Mesh Refinement Technique for Numerical Modeling of Relativistic Jets // **Lobachevskii Journal of Mathematics** – 2024. – V. 45, I. 1. – in print.

Заключение и дискуссия

- Разработана вычислительная модель эволюции релятивистских джетов на основе регулярных и адаптивных сеток.
- Разработана эффективная параллельная реализация вычислительной модели на основе технологий **Coarray Fortran** и **OpenMP** с использованием авторской методики оптимизации кода.
- Необходим переход к технологиям PGAS не только поддержкой операции Remote Memory Access (**RMA**), но и операции Remote Procedure Call (**RPC**) в стандарте языка Фортран.

Работа поддержана грантом
Российского научного фонда № 23-11-00014



Спасибо за внимание!