

УДК 004.942

doi 10.26089/NumMet.v16r446

ТРЕХМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ НА INTEL XEON PHI: ОПТИМИЗАЦИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ И ПРИМЕРЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

И. Б. Мееров¹, С. И. Бастраков², И. А. Сурмин³, А. А. Гonosков⁴,
Е. С. Ефименко⁵, А. В. Башинов⁶, А. В. Коржиманов⁷, А. В. Ларин⁸,
А. А. Муравьев⁹, А. И. Розанов¹⁰, М. Р. Савичев¹¹

Рассматривается проблема эффективного использования ускорителей Xeon Phi при моделировании лазерной плазмы. Приводится анализ особенностей архитектуры Xeon Phi, влияющих на производительность кода при численном моделировании плазмы методом частиц в ячейках. Описывается параллельный программный комплекс PICADOR, оптимизированный ранее для расчетов на ускорителях. Производительность программного комплекса на Xeon Phi в сравнении с CPU исследуется при решении трех вычислительно трудоемких задач. Обсуждается соотношение времени расчета на Xeon Phi и CPU на разных этапах метода частиц в ячейках. Демонстрируется, что в зависимости от особенностей задачи Xeon Phi может как опережать, так и отставать от CPU при выполнении расчетов.

Ключевые слова: физика плазмы, метод частиц в ячейках, высокопроизводительные вычисления, Xeon Phi, оптимизация производительности.

1. Введение. Численное моделирование лазерной плазмы — одна из актуальных областей современной вычислительной физики, имеющая обширное практическое применение. Среди важных приложений можно отметить проектирование компактных источников для адронной терапии при лечении онкологических заболеваний, создание фабрик короткоживущих изотопов для биоимиджинга, разработку приборов для исследования внутримолекулярных и внутриатомных процессов. Для численного моделирования в данной области широко применяется метод частиц в ячейках [1] (метод макрочастиц, Particle-In-Cell, PIC). Одной из основных целей ученых, развивающих данный метод в контексте моделирования плазмы [2, 3], является повышение точности расчетов до уровня, достаточного для замены как можно большего числа натуральных экспериментов вычислительными.

Суперкомпьютерные системы играют значительную роль в достижении указанной цели. Так, метод PIC представляет плазму в виде совокупности большого количества взаимодействующих макрочастиц, объединяющих частицы с близкими свойствами. В настоящее время известны актуальные для науки задачи, для достижения приемлемой точности в которых требуется использование $\sim 10^{10}$ макрочастиц,

¹ Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского (ННГУ), просп. Гагарина, 23, 603950, г. Нижний Новгород; зам. зав. каф., e-mail: meerov@vmk.unn.ru

² Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского (ННГУ), просп. Гагарина, 23, 603950, г. Нижний Новгород; ассистент, e-mail: sergey.bastrakov@gmail.com

³ Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского (ННГУ), просп. Гагарина, 23, 603950, г. Нижний Новгород; мл. науч. сотр., e-mail: i.surmin@gmail.com

⁴ Институт прикладной физики РАН (ИПФ РАН), ул. Ульянова, 46, 603950, г. Нижний Новгород; науч. сотр., e-mail: arkady.gonoskov@gmail.com

⁵ Институт прикладной физики РАН (ИПФ РАН), ул. Ульянова, 46, 603950, г. Нижний Новгород; мл. науч. сотр., e-mail: nngreen@mail.ru

⁶ Институт прикладной физики РАН (ИПФ РАН), ул. Ульянова, 46, 603950, г. Нижний Новгород; мл. науч. сотр., e-mail: abvk@inbox.ru

⁷ Институт прикладной физики РАН (ИПФ РАН), ул. Ульянова, 46, 603950, г. Нижний Новгород; науч. сотр., e-mail: korzhimanov.artem@gmail.com

⁸ Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского (ННГУ), просп. Гагарина, 23, 603950, г. Нижний Новгород; студент, e-mail: larin.anton.vyacheslavovich@gmail.com

⁹ Институт прикладной физики РАН (ИПФ РАН), ул. Ульянова, 46, 603950, г. Нижний Новгород; мл. науч. сотр., e-mail: sashamur@gmail.com

¹⁰ Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского (ННГУ), просп. Гагарина, 23, 603950, г. Нижний Новгород; студент, e-mail: rozantolya@mail.ru

¹¹ Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского (ННГУ), просп. Гагарина, 23, 603950, г. Нижний Новгород; студент, e-mail: savimisha@gmail.com

расположенных в $\sim 10^9$ ячейках пространственной сетки, что определяет актуальность применения суперкомпьютеров и разработки соответствующего программного обеспечения (ПО). Работы по созданию такого ПО ведутся научными группами в России [4–10] и за рубежом [11–14]. Существуют и активно применяются программные комплексы (PIC-коды), реализующие метод частиц в ячейках и ориентированные на традиционные (OSIRIS [11], VLPL [12], VPIC [13]) и гетерогенные (PIConGPU [14]) кластерные системы. С 2010 г. авторами настоящей статьи разрабатывается программный комплекс PICADOR [15, 16], имеющий реализации широкого спектра численных схем, оптимизированных для современных кластерных систем с использованием методов динамической балансировки нагрузки [17]. Комплекс PICADOR допускает использование ускорителей GPU и Xeon Phi [18]. Функциональность может быть расширена посредством специализированного интерфейса Module Development Kit (MDK) [19]. Проект развивается в сотрудничестве с исследовательскими группами из ИПФ РАН (Нижний Новгород) и Чалмерского технологического университета (Гетеборг, Швеция).

Данная работа посвящена вопросам эффективной реализации метода частиц в ячейках для ускорителей Intel Xeon Phi, выполненной в контексте программного комплекса PICADOR. Первые шаги в этом направлении были сделаны нами в работах [18, 20]. Было показано, что применение различных подходов к оптимизации расчетов (улучшение локальности обращений в память, частичная векторизация и др.) при решении модельной задачи при 50 макрочастицах на ячейку позволяет достичь 7,7 наносекунд на макрочастицу на ускорителе Intel Xeon Phi 5110P (60 ядер, 240 потоков, 8 ГБ ОЗУ) при базовом значении 14 наносекунд на макрочастицу на Intel Xeon E5-2660 с частотой 2,2 ГГц (Sandy Bridge, 8 ядер, 20 МБ кэш-памяти, поддержка AVX). Кроме того, необходимо отметить работу [21], основным результатом которой тоже является оптимизация для Xeon Phi одной из реализаций метода частиц в ячейках. При решении модельной задачи, содержащей вдвое большее число макрочастиц на ячейку, на ускорителе Intel Xeon Phi достигнуто 1,7 наносекунд на макрочастицу. Приведенные выше результаты нельзя сопоставлять напрямую по следующим причинам: в отличие от широко применяемой в PIC-моделировании сетки Йи (Yee), в работе [21] использована прямая сетка, кардинально упрощающая векторизацию вычислений, а также использовано вдвое большее число частиц, что повышает эффективность использования ресурсов.

В настоящей статье мы делаем следующий шаг в изучении производительности комплекса PICADOR на Xeon Phi в реальных условиях. Для этого мы рассматриваем следующие задачи, представляющие научный интерес: лазерное ускорение протонов в тонких мишенях с субволновыми неоднородностями на облучаемой стороне, компрессия лазерных импульсов на кильватерной плазменной волне, генерация гамма-излучения в сходящейся дипольной волне. Значения параметров расчета, влияющих на производительность кода, выбираются исходя из физики задачи. Основное внимание уделяется сравнению производительности кода на CPU и Xeon Phi и выделению особенностей задачи, влияющих на время расчета.

2. Краткая характеристика вычислительной схемы метода частиц в ячейках. В этом разделе приводится краткое описание вычислительной схемы метода частиц в ячейках в соответствии с [18], подробное описание метода содержится в [1].

Область моделирования имеет форму прямоугольного параллелепипеда со сторонами, параллельными осям декартовой системы координат. В расчетной области заданы электрическое и магнитное поля \mathbf{E} и \mathbf{B} , динамика электромагнитного поля описывается системой уравнений Максвелла. В методе частиц в ячейках плазма моделируется набором из N заряженных макрочастиц, каждая из которых характеризуется переменными импульсом \mathbf{p} и координатами \mathbf{r} , а также постоянными массой m и зарядом q . Координаты и скорость частиц \mathbf{v} меняются согласно релятивистским уравнениям движения. Движение заряженных частиц создает плазменные токи \mathbf{j} , которые входят в качестве источников в уравнения Макс-

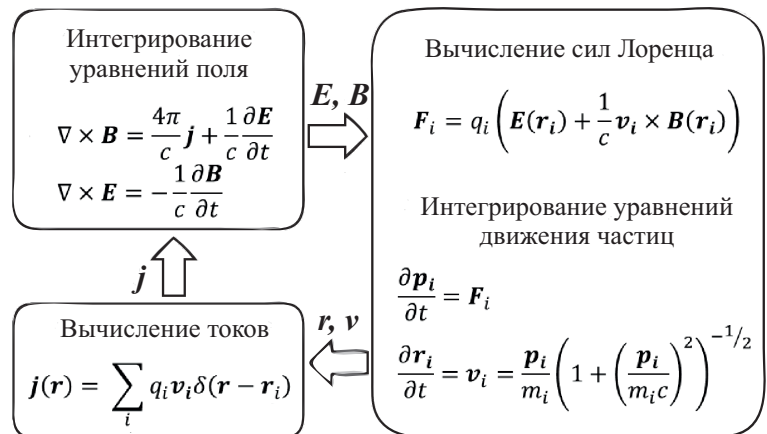


Рис. 1. Вычислительная схема метода частиц в ячейках. Итерация цикла соответствует моделированию одного шага по времени.

Уравнения приведены в системе СГСЭ. Надписи над стрелками показывают зависимости по данным между этапами метода [17]

велла, замыкая, таким образом, самосогласованную систему уравнений.

Вычислительная схема метода с основными уравнениями и схемой зависимости по данным приведена на рис. 1. Начальные условия состоят из значений электрического и магнитного полей, а также координат и скоростей частиц в начальный момент времени. На каждой итерации по времени по текущим данным частиц и полей вычисляется состояние системы в следующий момент времени. Каждая итерация состоит из 4 основных этапов: интегрирование уравнений Максвелла; интерполяция полей в точке нахождения каждой частицы и вычисление силы Лоренца, действующей на частицу; интегрирование уравнений движения частиц; вычисление (“взвешивание”) токов. При программной реализации вычисление силы Лоренца и интегрирование уравнений движения обычно объединяются в целях повышения производительности.

3. Факторы, влияющие на производительность PIC-кодов. Главным фактором, влияющим на производительность и масштабируемость PIC-кодов и используемых в них реализаций численных схем, является эффективность использования ресурсов параллелизма на разных уровнях. Требуют решения вопросы организации параллельной обработки на уровне распределенной памяти (узлы кластера), на уровне общей памяти (вычислительные ядра в рамках одного узла), на уровне SIMD-инструкций (в рамках каждого ядра процессора), отдельного обсуждения заслуживает вопрос об использовании ускорителей.

Отметим, что потенциальная возможность параллельных расчетов заложена в основу метода частиц в ячейках. Действительно, в методе PIC макрочастицы не взаимодействуют друг с другом напрямую, а операции частица–сетка являются пространственно локальными. Используя данные факторы, разработчики ПО разделяют расчетную область на домены по территориальному принципу и организуют обмены между соседними доменами. Сочетание этого подхода с эффективными схемами балансировки нагрузки позволяет при решении ряда задач достигать приемлемой масштабируемости при использовании тысяч узлов кластера [11, 22].

При работе в рамках одного узла перед программистами вновь встает задача балансировки, однако, как показывает практика, она решается достаточно успешно базовыми средствами OpenMP, что в сочетании с использованием реализаций SMT (Simultaneous MultiThreading) в современных процессорах позволяет добиться близкой к единице эффективности масштабируемости относительно однопоточной реализации [18].

К сожалению, при переходе к следующему уровню параллелизма (SIMD) возникают значительные трудности [18, 20, 21]. Причины этих трудностей заключены в самой природе метода, одновременно обрабатывающего большие массивы данных, в которых содержится информация о координатах и скоростях макрочастиц, а также об электромагнитном поле, заданном в узлах сетки, дискретизирующей трехмерную область моделирования. В силу особенностей вычислительной схемы метода для разных ее этапов целесообразно применять разные схемы расположения в памяти данных о полях и макрочастицах. Это соображение справедливо как с точки зрения эффективности работы с памятью (минимизация количества кэш-промахов), так и в контексте сокращения накладных расходов на упаковку/распаковку данных при работе с векторными командами. Насколько нам известно, на сегодняшний день нет универсального решения данной проблемы, хотя в ряде частных случаев удается добиться хороших результатов [23].

Достижение приемлемой производительности вычислений на ускорителях GPU также вызывает большой интерес. Так, при реализации на GPU возникает проблема эффективной организации доступа к памяти в условиях работы тысяч потоков и малого объема кэш-памяти. Некоторые методы решения указанных проблем описаны авторами PIC-кодов [14, 22, 23].

Остановимся подробнее на факторах, ограничивающих производительность PIC-кодов на Xeon Phi. Сопроцессор Intel Xeon Phi — ускоритель вычислений общего назначения, реализован в виде отдельной платы, присоединяемой к базовой вычислительной системе через слот PCI Express. Указанный недостаток Xeon Phi в сочетании с ограниченным объемом оперативной памяти на сопроцессоре (8–16 ГБ в зависимости от модели) может привести к низкой производительности из-за необходимости копирования данных между основной системой и ускорителем. Применительно к PIC-кодам эта проблема решается за счет использования достаточно большого числа узлов кластера, что, по крайней мере в решаемых нами задачах, позволяет уложиться в заявленные объемы памяти. Xeon Phi содержит 61 вычислительное ядро с аппаратной поддержкой до 244 потоков команд. Каждое ядро является полнофункциональным, но облегченным (не поддерживает внеочередное выполнение, прогноз ветвлений и другие усовершенствования, значительно влияющие на производительность). В то же время, ядра Xeon Phi поддерживают специально разработанный векторный набор команд, для обработки которых предназначен 512-битный блок векторных вычислений. Блок содержит 32 специальных 512-битных регистра и допускает выполнение за 1 такт до 8 операций над числами с плавающей точкой двойной точности (в два раза больше, чем в AVX (Advanced Vector Extensions)). Одной из отличительных особенностей системы команд является

аппаратная поддержка операций Fused Multiply-Add (FMA), реализующих операцию $x = x + y \times z$ без промежуточного округления. Пиковая производительность при расчетах с двойной точностью составляет около 1 TFLOPS, что приблизительно в 5 раз превосходит пиковую производительность современных CPU.

Рассмотрим, какой вклад в производительность PIC-кодов вносят отмеченные выше особенности архитектуры. Так, уменьшение производительности ядер составляет потенциальную проблему в связи с тем, что, например, наличие FMA-инструкций, дающих вклад в размере 50% от пиковой производительности, далеко не всегда может быть эффективно использовано в реализации численных схем. В то же время, практика показывает, что наличие большого количества ядер с аппаратной поддержкой SMT можно задействовать достаточно эффективно, по крайней мере в тех задачах, где число частиц на ячейку является достаточно большим (далее будет показано, что при решении некоторых задач оптимизированным кодом ускоритель Xeon Phi начинает опережать CPU по скорости расчетов, начиная по крайней мере с 10 частиц на ячейку).

С нашей точки зрения, основным фактором, лимитирующим эффективность использования PIC-кодов на Xeon Phi, является сложность векторизации кода. Данная проблема, описанная выше в контексте программирования для CPU, еще в большей степени проявляется на Xeon Phi, обладающем более вместительными векторными регистрами. Код, который плохо векторизуется при длине вектора 4, обычно еще хуже векторизуется при длине вектора 8. Тем не менее, применение специальных схем векторизации кода с использованием интринсиков в сочетании с достаточно хорошей эффективностью масштабируемости на общей памяти при большом числе потоков позволяет частично решить проблему, получив в итоге выигрыш по времени по сравнению с CPU. Схожесть подходов к оптимизации вычислений для CPU и Xeon Phi, сравнительно малые трудозатраты на адаптацию кода для Xeon Phi, а также перспективы появления более производительной редакции ускорителя делают его достаточно перспективным устройством для численного моделирования плазмы.

4. Краткое описание программного комплекса PICADOR. Программный комплекс для моделирования плазмы PICADOR ориентирован на решение больших задач в области моделирования лазерной плазмы на гетерогенных кластерных системах с использованием многоядерных центральных процессоров, графических процессоров и сопроцессоров Intel Xeon Phi. PICADOR использует метод частиц в ячейках и его расширения для повышения точности и учета дополнительных физических эффектов. Поддерживаются конечно-разностные схемы FDTD (Finite-Difference Time-Domain) [24] и NDF (Numerical Dispersion Free) [12] для численного интегрирования уравнений поля, генерация лазерного импульса на границе, периодические и поглощающие граничные условия [25], метод Бориса для интегрирования уравнений движения [1], формфакторы частиц первого и второго порядка, схемы взвешивания токов Есиркепова [26] и Вилласенора–Бунемана [27], бегущее окно, а также динамическая балансировка нагрузки [17].

Программная реализация выполнена на языке C++ с использованием объектно-ориентированной методологии. При проектировании программного комплекса предусмотрена возможность расширения кода новыми модулями, реализующими дополнительные численные схемы (интерфейс MDK, Module Development Kit [19]). В 2014–2015 гг. с использованием указанного интерфейса реализованы и успешно интегрированы в PICADOR несколько численных схем. Для достижения лучшей производительности ядро кода, содержащее наиболее вычислительно трудоемкие операции, реализовано с использованием низкоуровневых структур данных.

Расчетная часть кода является полностью параллельной. Реализация для кластерных систем выполнена с использованием технологии MPI. Расчеты внутри одного узла распараллелены при помощи технологии OpenMP. Векторизация кода для использования SIMD-расширений центральных процессоров достигается при помощи оптимизирующих компиляторов Intel C++ Compiler либо GCC. Программная реализация для графических процессоров выполнена при помощи NVIDIA CUDA. Реализация оптимизирована с использованием возможностей различных уровней памяти GPU и высокоэффективных атомарных операций в современных графических процессорах. Перенос вычислений на Intel Xeon Phi в основном не требовал значительной модификации кода. Так, многие оптимизации кода, изначально выполняемые для повышения производительности на Xeon Phi, сокращали время работы программы и на центральном процессоре. Тем не менее, для лучшей векторизации численных схем на Xeon Phi были разработаны низкоуровневые реализации с использованием интринсиков.

При выполнении расчетов комплекс PICADOR показывает следующие результаты производительности и масштабируемости [16]. Эффективность сильной масштабируемости на распределенной памяти PICADOR достигает 70% при переходе от 16 до 2048 ядер CPU. Эффективность сильной масштабируемости на общей памяти в некоторых задачах достигает 99% при переходе от 1 до 16 ядер CPU, для Xeon

Phi — 78% при переходе от 1 до 60 ядер. Ускорение при использовании сопроцессора Xeon Phi составляет около двух раз по сравнению с 8-ядерным центральным процессором. Все перечисленные результаты получены при выполнении расчетов с двойной точностью.

Программный комплекс PICADOR активно используется в научных расчетах. С его помощью был решен ряд актуальных задач современной физики плазмы. В частности, показана возможность эффективной генерации пучка высокоэнергичных многозарядных ионов при облучении структурированных твердотельных мишеней, обнаружен новый режим взаимодействия в условиях доминирования радиационных потерь — так называемый аномальный радиационный захват. Проведен ряд работ по исследованию динамики взаимодействия в условиях развития квантово-электродинамических каскадов — электрон-позитронных лавин, рождающихся в сверхсильных полях. Расчеты ведутся с использованием суперкомпьютеров МВС-100К, МВС-10П (МЦ РАН), “Ломоносов” (МГУ им. М.В. Ломоносова) и “Лобачевский” (ННГУ).

5. Тестовая инфраструктура и способ оценки производительности. При выполнении экспериментов использовался узел кластера ННГУ “Лобачевский”, содержащий 2 процессора Intel Sandy Bridge E5-2660 2.2 ГГц (8 ядер на каждом CPU), 64 ГБ оперативной памяти и 2 сопроцессора Intel Xeon Phi 5110P (60 ядер, 240 потоков, 8 ГБ памяти). Задачи запускались либо на двух CPU с использованием всех доступных вычислительных ядер (2 процесса по 8 потоков в каждом), либо на двух Xeon Phi (2 процесса по 240 потоков в каждом). Предварительно было установлено, что данный режим запуска в большинстве случаев является оптимальным для текущей реализации. Сравнение производительности выполнялось на каждом этапе вычислительной схемы и в целом, отдельно замерялось время обменов данными. При обсуждении задач и достигнутых результатов обращалось внимание на следующие факторы, влияющие на производительность: число макрочастиц на ячейку; наличие или отсутствие дисбаланса нагрузки между процессами в результате разбиения расчетной области на домены; наличие или отсутствие дисбаланса между потоками в одном домене.

На графиках производительности используются следующие краткие обозначения этапов и расширений метода частиц в ячейках: “Токи” — взвешивание токов, “Частицы” — интерполяция поля и движение частиц, “FDTD” — интегрирование уравнений поля, “PML” — поглощающие граничные условия, “Генератор” — генерация импульса на границе расчетной области, “QED” — рождение фотонов и электрон-позитронных пар, “Обмены” — общее время обменов данными между узлами, “Вычисление” — общее время вычислительной части.

6. Лазерное ускорение протонов в тонких мишенях с субволновыми неоднородностями на облучаемой стороне. Одной из актуальных проблем современной физики взаимодействия лазерного излучения сверхвысокой интенсивности с веществом является генерация и ускорение пучков протонов и других ионов [28]. При относительно небольших интенсивностях излучения, не превышающих 10^{20} Вт/см², наиболее эффективным способом ускорения является так называемый метод TNSA (Target Normal Sheath Acceleration) [29]. В этом методе ускорение происходит с обратной стороны тонкой (толщиной от нескольких нанометров до нескольких микрон) металлической фольги или пластиковой пленки, облучаемой сфокусированным лазерным импульсом. Ускорение происходит за счет квазистатического поля, возникающего при разлете облака электронов, нагретых лазерным излучением до релятивистских температур.

Несмотря на простоту реализации, метод TNSA, однако, обладает относительно невысокой эффективностью — даже в наилучших условиях в энергию ускоряемых протонов идет не более нескольких процентов энергии падающего лазерного импульса [30]. В последнее время обсуждается несколько способов увеличения эффективности. Один из них заключается в том, чтобы нанести на облучаемую поверхность мишени субволновые неоднородности, которые улучшили бы поглощение лазерного излучения и тем самым увеличили бы количество энергии, передаваемой частицам [31]. Эта задача анализировалась в ряде работ путем двумерного моделирования. Однако для анализа ситуации в реальном эксперименте, особенно в случае неоднородностей сложной формы, необходимо проведение полномасштабного трехмерного моделирования, которое требует большого количества вычислительных ресурсов. По этой причине такое моделирование может в значительной степени выиграть от использования Xeon Phi. Для демонстрационных целей предполагалось, что лазерный импульс падает нормально на мишень и имеет относительно широкий поперечный размер. Это позволило решать задачу в предположении представления импульса в виде плоской волны.

Облучаемая мишень представляла собой фольгу толщиной 0,3 мкм, состоящую из ионов золота Au_{197}^{+31} , компенсированных соответствующим количеством электронов. Концентрация электронов в слое составляла 3×10^{21} см⁻³. Слой ускоряемых протонов располагался на обратной стороне мишени и имел

толщину 0,1 мкм. На облучаемую поверхность мишени были нанесены периодические прямоугольные неоднородности, образующие так называемую наногребенку. Период наногребенки составлял 0,5 мкм, высота — 0,3 мкм, а толщина отдельного выступа — 0,15 мкм. Начальная температура плазмы равнялась 100 эВ, что является обычным значением для столкновительного нагрева в поле мощного лазерного излучения. Как было отмечено выше, лазерный импульс предполагался бесконечным в поперечном направлении за счет использования периодических граничных условий. В продольном направлении он имел форму кривой Гаусса с шириной на полувысоте по амплитуде, равной 42 фс. Длина волны излучения равнялась 1 мкм. Интенсивность излучения в максимуме достигала значения $3,75 \times 10^{19}$ Вт/см². Такие параметры являются типичными для титан-сапфировых лазерных систем пиковой мощностью в десятки тераватт, широко распространенных в современных лабораториях. Расчетная область имела физические размеры $12 \times 1 \times 1$ мкм, а соответствующая сетка — $512 \times 64 \times 64$ ячеек. Шаг по времени составил 0,026 фс, а полное время расчета — 300 фс; таким образом, было совершено 11 512 шагов по времени.

Максимальная энергия ускоренных протонов (МэВ)

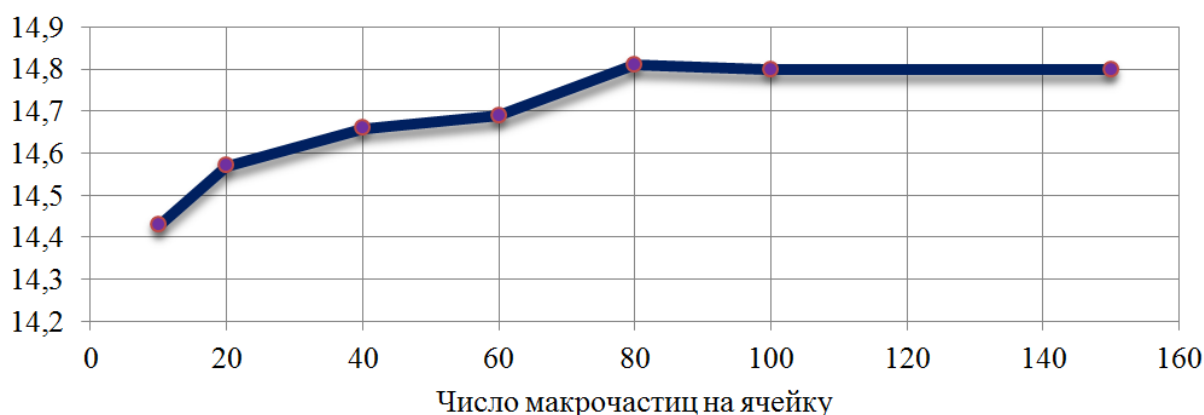


Рис. 2. Зависимость максимальной энергии ускоренных протонов от числа макрочастиц на ячейку

Одним из важнейших параметров PIC-моделирования является число макрочастиц на ячейку (*particles per cell*, *ppc*). Обсуждаемая задача отличается существенным влиянием, которое оказывает данный параметр на результаты моделирования. Как показано на рис. 2, при варьировании *ppc* от 10 до 80 наблюдается непрерывный рост максимальной энергии ускоренных протонов в конце расчета, пока он не достигает своего максимума в 14,81 МэВ. Это объясняется тем фактом, что малого числа частиц не хватает для разрешения “хвоста” функции распределения нагретых электронов по энергиям. В то же время известно, что именно “хвост” этого распределения определяет максимальную энергию, которую может получить ускоренный протон. Учитывая тот факт, что начиная с 80 макрочастиц на ячейку рост максимальной энергии прекращается, именно это значение лучше всего использовать для численного моделирования.

Проанализируем производительность приложения при изменении числа макрочастиц на ячейку (*ppc*) от 10 до 80 (рис. 3). Из диаграммы видно, что независимо от значения *ppc* Xeon Phi уверенно опережает Xeon как по времени вычислительной части (до 2,6 раза при *ppc* = 80), так и по общему времени счета (до 1,62 раза при *ppc* = 80), причем с ростом *ppc* преимущество ожидаемо возрастает вместе с объемом вычислений. Такая картина наблюдается на всех этапах расчета за исключением обменов, где Xeon Phi в несколько раз отстает от CPU. Данное соотношение времен в основном обусловлено необходимостью обмена информацией между MPI-процессами. При работе в рамках одного узла обмен данными между CPU реализуется средствами MPI на общей памяти, тогда как при использовании Xeon Phi требуются дополнительные обмены данными между ускорителем и CPU. В целом при решении этой задачи реализация для Xeon Phi показывает свою эффективность.

7. Компрессия лазерных импульсов на кильватерной плазменной волне. Другой задачей, на которой проводилось сравнение производительности CPU и Xeon Phi, является компрессия фемтосекундных лазерных импульсов до предельно-коротких длительностей (1–2 периода поля). В настоящее время хорошо освоена технология генерации фемтосекундных лазерных импульсов с длиной волны 0,8–1 мкм петаваттного уровня мощности [32]. Длительность импульсов на выходе из лазерной системы составляет около 10 периодов поля. Однако в ряде приложений, таких как генерация аттосекундных импульсов и ускорение частиц, требуются мощные предельно короткие лазерные импульсы. Генерация таких импульсов в рамках лазерной системы является труднопреодолимой задачей, поэтому необходимы другие

способы укорочения лазерных импульсов. Одним из способов является компрессия фемтосекундных импульсов кильватерной плазменной волной, возбуждаемой самим импульсом [33]. Для создания плазмы используется струя газа, который ионизируется под действием лазерного импульса. Ввиду неоднородности распределения электронов в плазменной волне, передний фронт импульса движется в более плотной плазме, имеет меньшую скорость, чем задний фронт,двигающийся в менее плотной плазме. Такое взаимодействие приводит к компрессии и формированию резкого переднего фронта импульса. Важное и недостаточно изученное влияние накладывает эффект нестационарной самофокусировки коротких импульсов [34], ввиду чего необходимо использование трехмерного моделирования. При численном моделировании данной задачи необходимо использовать большое число макрочастиц, чтобы исключить влияние шумов пространственного распределения плазмы, определяющего компрессию.

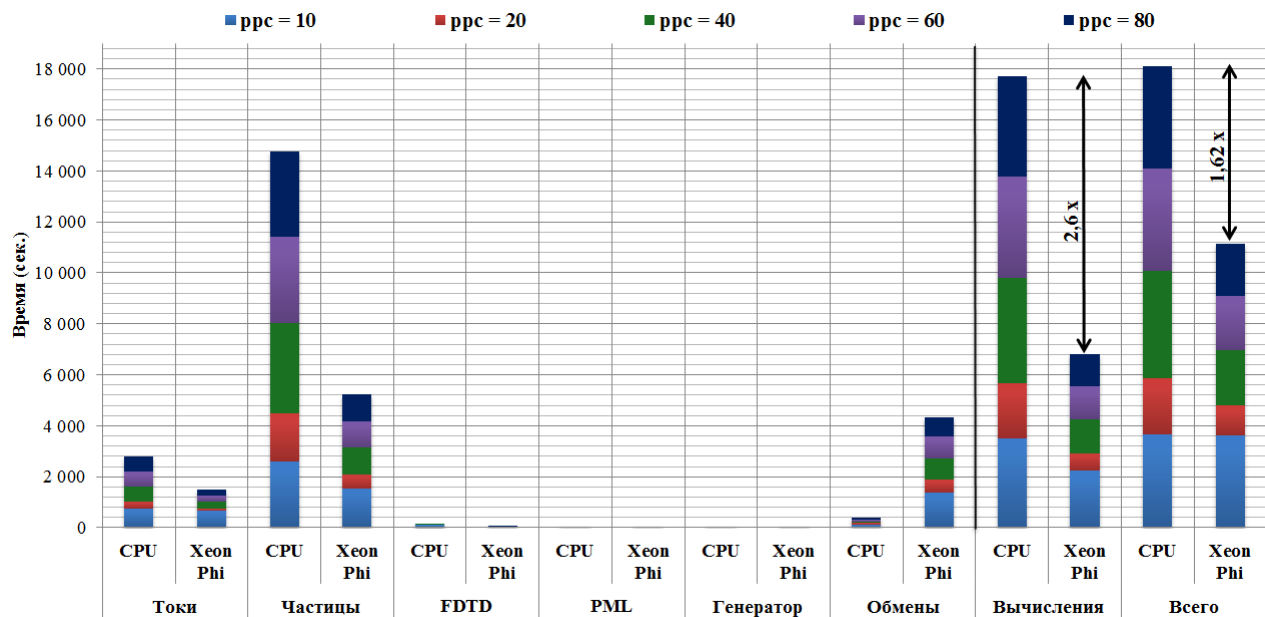


Рис. 3. Время расчета на разных этапах метода частиц в ячейках с использованием двух CPU или двух Xeon Phi. Число макрочастиц на ячейку ppc варьируется от 10 до 80. Столбцы, соответствующие времени расчета при разном значении ppc , наложены друг на друга

Для моделирования описанного взаимодействия использовался линейно-поляризованный импульс с огибающей \sin^2 , длительностью 30 фс по полуширине интенсивности и супергауссовым поперечным профилем с диаметром 10 мкм. Длина волны составляла 0,8 мкм, пиковая интенсивность являлась равной $3,3 \times 10^{19}$ Вт/см². Лазерный импульс фокусируется на однородную плазму с концентрацией 8×10^{18} см⁻³. Расчетная область $20 \times 24 \times 24$ мкм разбивалась на $256 \times 128 \times 128$ ячеек. Количество макрочастиц на ячейку равнялось 20.

Полученные времена счета на двух Xeon Phi по сравнению с двумя CPU представлены на рис. 4. Как и в предыдущей задаче, Xeon Phi опережает CPU на всех наиболее трудоемких этапах расчета, кроме обменов. Выигрыш по времени работы вычислительной части составляет 1,5 раза, тогда как общее время расчета с учетом обменов данными лучше для Xeon Phi в 1,25 раза. На первый взгляд может сложиться впечатление, что указанные показатели выглядят существенно скромнее, чем итоговые результаты в предыдущей задаче, но это в полной мере объясняется в 4 раза меньшим числом частиц, задействованных в расчетах. Действительно, в предыдущей задаче при $ppc = 20$ два Xeon Phi обгоняют два CPU в 1,21 раза, что весьма близко к обсуждаемому результату. В целом необходимо отметить, что использование реализации для Xeon Phi для решения данной задачи является целесообразным.

8. Генерация гамма-излучения в сходящейся дипольной волне. В сверхсильных электромагнитных полях ($> 10^{23}$ Вт/см²) становятся возможными принципиально новые процессы (испускание жестких фотонов и рождение такими фотонами электрон-позитронных пар), которые открывают новые режимы взаимодействия в плазме, в частности каскадную генерацию частиц [35]. Подобные режимы планируется достичь в рамках проекта XCELS (EXawatt Center for Extreme Light Studies) [36] при взаимодействии релятивистски сильных лазерных полей с плазменными мишенями. Отметим, что гамма-излучение находит большое применение в ядерной физике: получение радиоизотопов для медицины, неинвазивный анализ ядерных отходов, генерация нейтронных пучков.

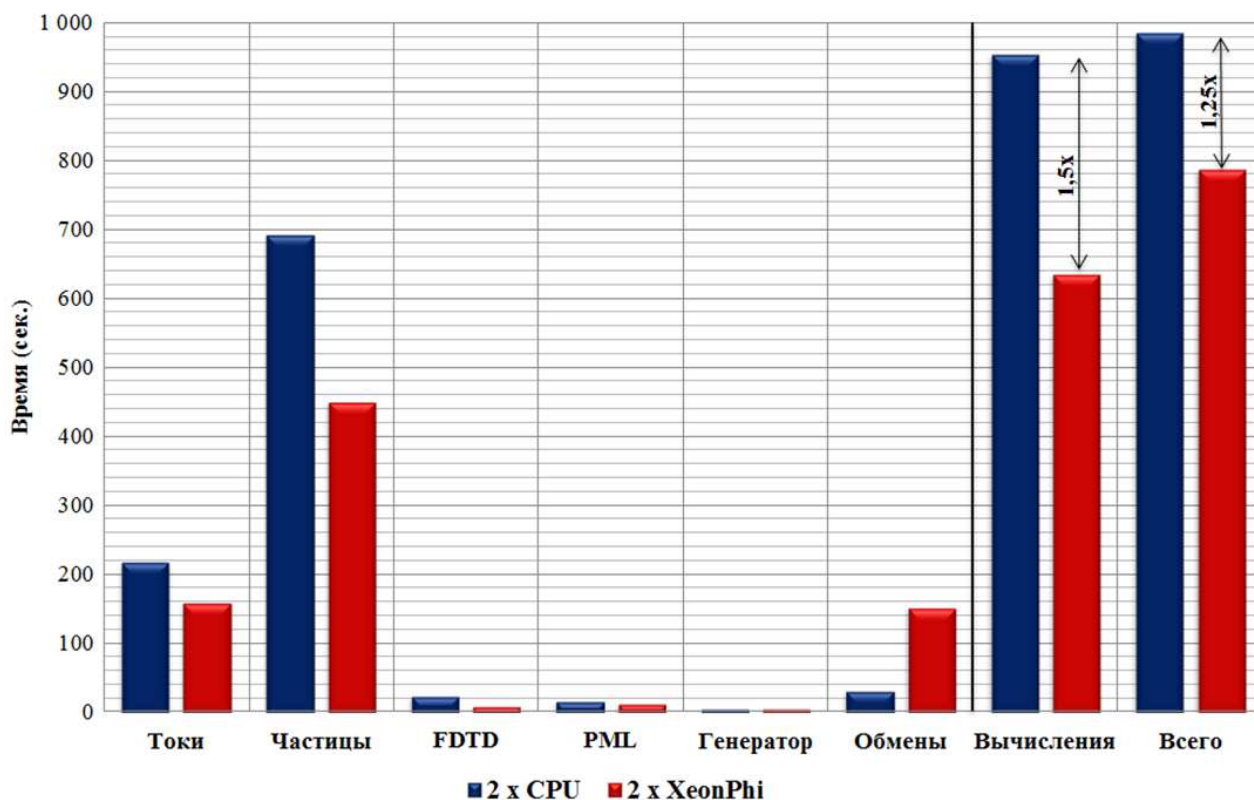


Рис. 4. Время расчета на разных этапах метода частиц в ячейках с использованием двух CPU или двух Xeon Phi. Число макрочастиц на ячейку $ppc = 20$

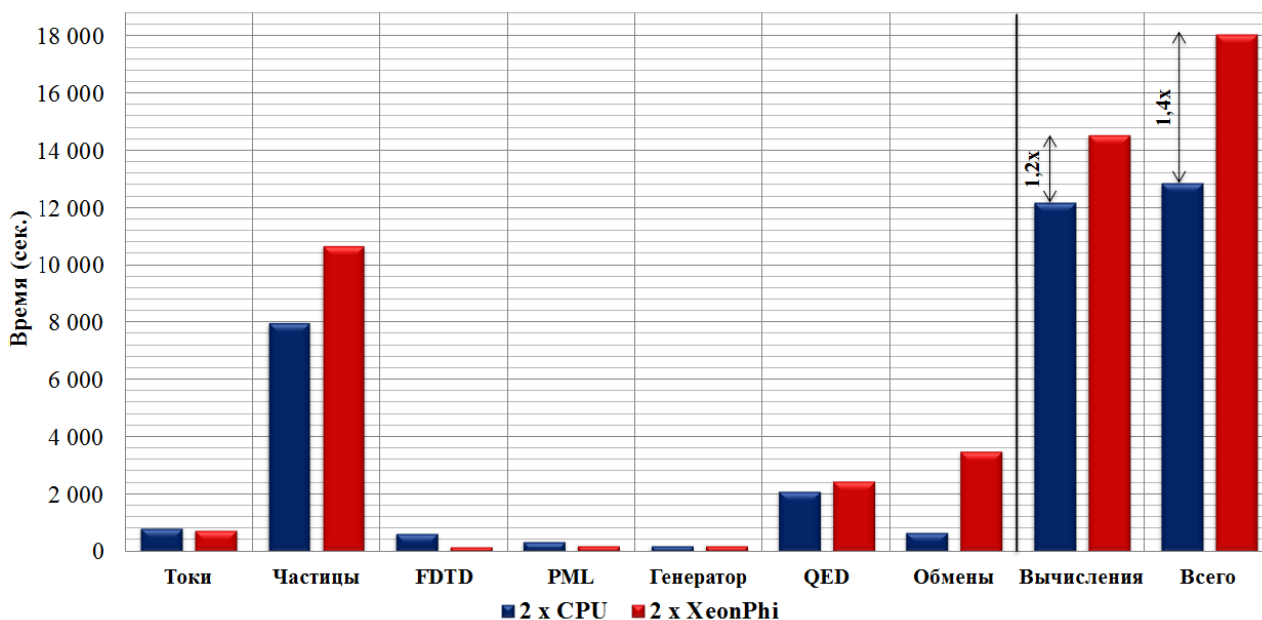


Рис. 5. Время расчета на разных этапах метода частиц в ячейках с использованием двух CPU или двух Xeon Phi. Число макрочастиц на ячейку ppc в начале расчета равно 20

Дипольная волна представляет собой инвертированное излучение диполя и реализует идеальную фокусировку лазерного излучения. Такую структуру поля в рамках проекта XCELS планируется моделировать в виде 12 сходящихся лазерных пучков, позволяющих достичь в фокусе интенсивностей на уровне 10^{26} Вт/см². В рассматриваемой задаче дипольная волна в форме полубесконечного импульса с резким передним фронтом падает на плазменную мишень. На начальном этапе мишень сжимается в центр расчет-

ной области. После этого при превышении порогового значения интенсивности лазерного поля развивается электромагнитный каскад, в процессе которого число электронов, позитронов и фотонов в области каскада растет экспоненциально. Такое взаимодействие перспективно с точки зрения эффективной конверсии лазерной энергии в энергию узконаправленного гамма-излучения [37].

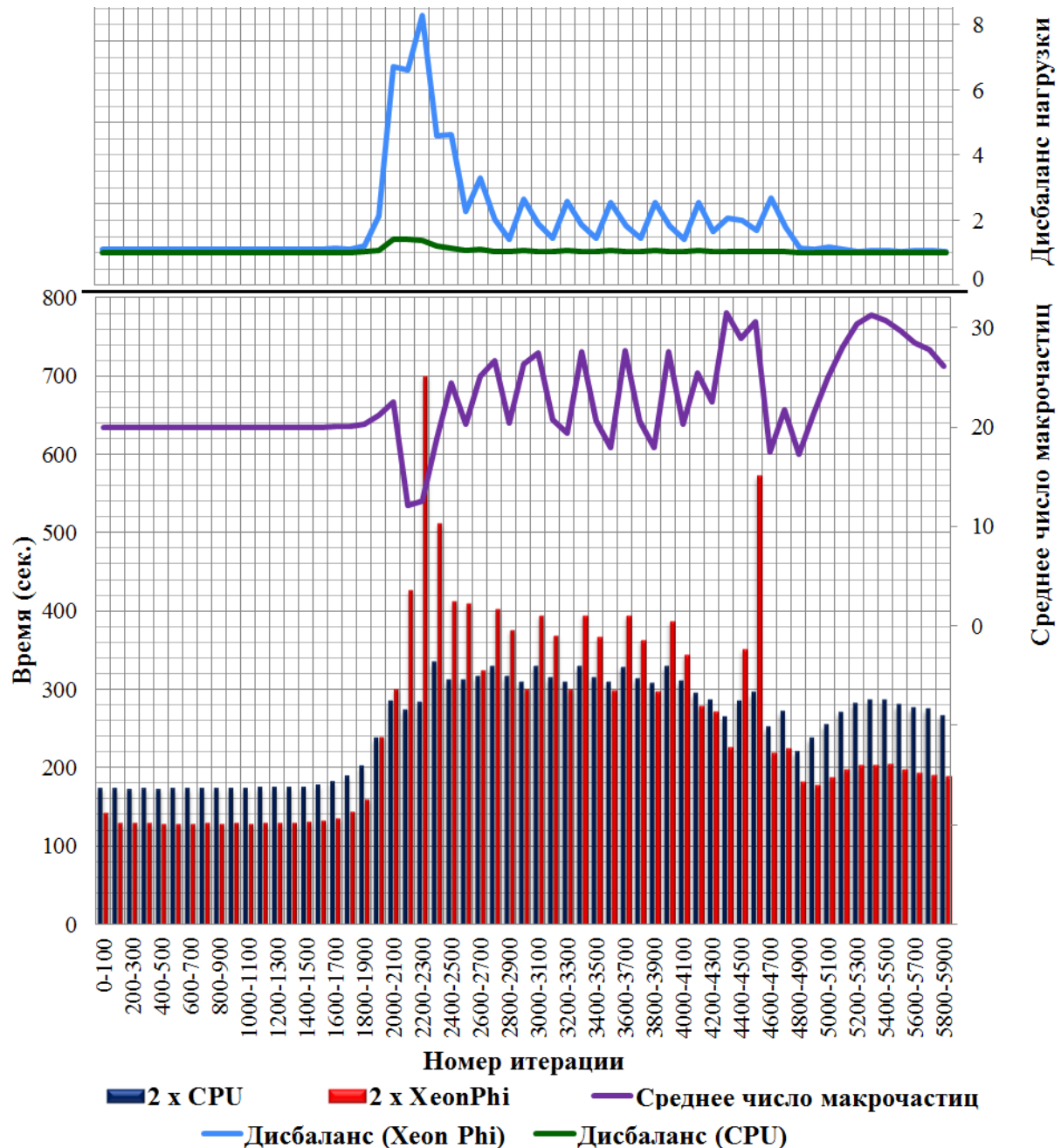


Рис. 6. Зависимость времени выполнения блоков последовательных итераций по времени от среднего числа макрочастиц на ячейку и дисбаланса нагрузки. Используются два CPU или два Xeon Phi

Для моделирования описанного взаимодействия использовалась полубесконечная дипольная волна с резким передним фронтом. Длина волны составляла $\lambda = 0,9$ мкм, мощность дипольной волны — 40 ПВт. Лазерный импульс фокусируется на однородную плазменную мишень диаметром 3 длины волны с концентрацией 10^{16} см $^{-3}$. Расчетная область $4 \times 4 \times 4$ мкм разбивается на $256 \times 256 \times 256$ ячеек. Количество макрочастиц на ячейку в начале расчета равно 20, однако в процессе развития каскада данный параметр сильно растет. При этом каскад идет в сильно ограниченной области размером порядка $0,2\lambda \times 0,2\lambda \times 0,5\lambda$ вблизи центра расчетной области, что приводит к сильно неоднородному распределению частиц по ячей-

кам.

Отметим, что неконтролируемое увеличение числа частиц может привести к неудовлетворительным затратам памяти и чрезмерному времени расчета. Для нивелирования данного эффекта при превышении некоторого порогового числа частиц в домене запускается процедура объединения частиц с близкими свойствами. Процессы генерации новых и объединения существующих частиц выполняются в рамках одного из этапов расчетного цикла (QED), не задействованного при решении первых двух задач.

На рис. 5 представлено сравнение времени работы двух Xeon Phi и двух CPU при решении данной задачи. Было обнаружено, что появившийся дополнительный этап расчета занимает существенное время как на CPU, так и на Xeon Phi. В целом результаты показывают, что данная задача не является перспективной с точки зрения использования текущей реализации для Xeon Phi в связи с ее отставанием по времени в 1,4 раза.

Обратив внимание на отставание по времени на всех наиболее трудоемких этапах, мы изучили, как меняется соотношение времени работы вычислительной части в ходе расчета (рис. 6). Построенная диаграмма показывает, что в начале расчета Xeon Phi демонстрирует преимущество над CPU. Далее ситуация кардинально меняется и Xeon Phi начинает существенно отставать. На заключительном этапе ситуация с соотношением времени качественно близка к начальному периоду. Построенный график изменения среднего числа части во времени (сиреневая линия) проясняет причины такого поведения. Выясняется, что в интересующий нас период времени происходят резкие скачки среднего числа макрочастиц на ячейку.



Рис. 7. Концентрация макрочастиц в начале расчета и в период возникновения каскада

Вследствие того, что преобладающее число макрочастиц сосредоточено в малой части расчетной области (рис. 7), при вычислениях на Xeon Phi возникает дисбаланс нагрузки между потоками (голубая линия на рис. 6). При этом отношение между максимальным и средним числом макрочастиц, обрабатываемых потоками, достигает 8. Отметим, что при аналогичном расчете на CPU используется всего 16 потоков, в связи с чем аналогичное отношение не превышает 1,5. Наличие дисбаланса нагрузки наряду с интенсивной работой процедур создания/объединения частиц приводит к росту времени расчета как на Xeon Phi, так и на CPU. При этом потеря эффективности параллелизма в текущей реализации на Xeon Phi приводит к значительно более существенному замедлению, что и оказывает определяющее воздействие на итоговое соотношение времен. Данный эффект может быть преодолен за счет создания интеллектуального планировщика, учитывающего динамику изменения числа макрочастиц в ячейках, что является одним из перспективных направлений дальнейшей работы.

9. Заключение. В настоящей статье представлена оптимизированная для Intel Xeon Phi реализация метода частиц в ячейках для моделирования лазерной плазмы, выполненная в рамках программного комплекса PICADOR. Сформулированы основные факторы, влияющие на производительность PIC-кодов на разных уровнях параллельных вычислительных систем. В отличие от ранее опубликованных результатов успешного использования Xeon Phi при решении модельной задачи, выполнен анализ производительности

в сравнении с многоядерным CPU в трех реальных расчетах.

Во всех рассмотренных задачах встречается *существенно неравномерное распределение частиц в расчетной области*. Данная разновидность дисбаланса может затруднить достижение хорошей производительности и на CPU, и на Xeon Phi, однако при надлежащем разбиении области на домены во всех задачах удастся достичь достаточного баланса нагрузки между процессами. Следующим фактором, существенно влияющим на эффективность использования Xeon Phi по сравнению с многоядерным CPU, является число макрочастиц на ячейку, используемое в расчетах. Показано, что даже при 10 макрочастицах на ячейку Xeon Phi вполне может обогнать CPU, и эта разница увеличивается вместе с числом используемых макрочастиц.

Тем не менее, существует еще одна особенность, ограничивающая класс задач, для решения которых целесообразно использовать обсуждаемую реализацию метода частиц в ячейках для Xeon Phi. Данная особенность в полной мере проявляется в третьей задаче и приводит к отставанию по сравнению с CPU. Суть эффекта заключается в необходимости учета при моделировании процессов создания/объединения частиц в сочетании с существенным изменением их количества и положения в расчетной области. Разработка планировщика, регулирующего нагрузку между потоками на Xeon Phi, является одним из направлений дальнейшей работы.

Подводя итоги, необходимо отметить, что Xeon Phi может быть эффективно использован для численного решения задач физики плазмы программным комплексом PICADOR с учетом описанных выше ограничений.

Работа частично поддержана РФФИ (гранты 14-07-31211 и 15-37-21015) и грантом МОН РФ (соглашение от 27 августа 2013 г. № 02.В.49.21.0003 между МОН РФ и ННГУ им. Н.И. Лобачевского).

Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции “Суперкомпьютерные дни в России 2015” (<http://russianscdays.org>).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование. М.: Энергоатомиздат, 1989.
2. Hockney R.W., Eastwood J.W. Computer simulation using particles. New York: McGraw-Hill, 1981.
3. Tskhakaya D. The particle-in-cell method // Lecture Notes in Physics. Vol. 739. Heidelberg: Springer, 2008. 161–189.
4. Tarakanov V.P. User's manual for code KARAT. Springfield: Berkeley Research Associates, 1992.
5. Romanov D.V., Bychenkov V.Yu., Rozmus W., Capjack C.E., Fedosejevs R. Self-organization of a plasma due to 3D evolution of the Weibel instability // Phys. Rev. Lett. 2004. **93**, N 21. 215004-1–215004-4.
6. Popov K.I., Bychenkov V.Yu., Rozmus W., Sydora R.D., Bulanov S.S. Vacuum electron acceleration by tightly focused laser pulses with nanoscale targets // Phys. Plasmas. 2009. **16**, N 5. 053106-1–053106-9.
7. Nerush E.N., Kostyukov I.Yu. Carrier-envelope phase effects in plasma-based electron acceleration with few-cycle laser pulses // Phys. Rev. Lett. 2009. **103**, N 3. 035001-1–035001-4.
8. Kraeva M.A., Malyshev V.E. Assembly technology for parallel realization of numerical models on MIMD-multicomputers // Future Gener. Comput. Syst. 2001. **17**, N 6. 755–765.
9. Берендеев Е.А., Иванов А.В., Лазарева Г.Г., Снытников А.В. Моделирование на суперЭВМ динамики плазменных электронов в ловушке с инверсными магнитными пробками и мультипольными магнитными стенками // Вычислительные методы и программирование. 2013. **14**. 149–154.
10. Перепелкина А.Ю., Левченко В.Д., Горячев И.А. Трехмерный кинетический код CFHall для моделирования замагниченной плазмы // Матем. моделирование. 2013. **25**, № 11. 98–110.
11. Fonseca R.A., Vieira J., Fiuza F., Davidson A., Tsung F.S., Mori W.B., Silva L.O. Exploiting multi-scale parallelism for large scale numerical modelling of laser wakefield accelerators // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2013. **55**, N 12. 124011-1–124011-9.
12. Pukhov A. Three-dimensional electromagnetic relativistic particle-in-cell code VLPL (Virtual Laser Plasma Lab) // Journal of Plasma Physics. 1999. **61**, N 3. 425–433.
13. Bowers K.J., Albright B.J., Yin L., Daughton W., Roytershteyn V., Bergen B., Kwan T.J.T. Advances in petascale kinetic plasma simulation with VPIC and Roadrunner // J. Phys.: Conf. Ser. 2009. **180**, N 1. doi 10.1088/1742-6596/180/1/012055.
14. Burau H., Wiedera R., Hönig W., et al. PICongPU: a fully relativistic particle-in-cell code for a GPU cluster // IEEE Transactions on Plasma Science. 2010. **33**, N 10. 2831–2839.
15. Bastrakov S., Donchenko R., Gonoskov A., Efimenko E., Malyshev A., Meyerov I., Surmin I. Particle-in-cell plasma simulation on heterogeneous cluster systems // Journal of Computational Science. 2012. **3**, N 6. 474–479.
16. Bastrakov S., Meyerov I., Surmin I., Efimenko E., Gonoskov A., Malyshev A., Shiryayev M. Particle-in-cell plasma simulation on CPUs, GPUs and Xeon Phi coprocessors // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 8488. Heidelberg: Springer, 2014. 513–514.

17. Бастраков С.И., Мееров И.Б., Сурмин И.А., Гоносков А.А., Ефименко Е.С., Малышев А.С., Ширяев М.А. Динамическая балансировка в коде PICADOR для моделирования плазмы // Вычислительные методы и программирование. 2013. **14**. 67–74.
18. Сурмин И.А., Бастраков С.И., Гоносков А.А., Ефименко Е.С., Мееров И.Б. Моделирование плазмы методом частиц в ячейках с использованием сопроцессоров Intel Xeon Phi // Вычислительные методы и программирование. 2014. **15**. 530–536.
19. Gonoskov A., Bastrakov S., Efimenko E., Ilderton A., Marklund M., Meyerov I., Muraviev A., Sergeev A., Surmin I., Wallin E. Extended particle-in-cell schemes for physics in ultrastrong laser fields: review and developments // Phys. Rev. E. 2015. **92**, N 2. <http://dx.doi.org/10.1103/physreve.92.023305>.
20. Surmin I.A., Bastrakov S.I., Efimenko E.S., Gonoskov A.A., Korzhimanov A.V., Meyerov I.B. Particle-in-cell laser-plasma simulation on Xeon Phi coprocessors // ArXiv preprint: 1505.07271v1 [physics.comp-ph]. <http://arxiv.org/abs/1505.07271v1>.
21. Nakashima H. Manycore challenge in particle-in-cell simulation: how to exploit 1 TFlops peak performance for simulation codes with irregular computation // Comput. Electr. Eng. (in press) doi 10.1016/j.compeleceng.2015.03.010.
22. Bussmann M., Burau H., Cowan T.E., Debus A., Huebl A., Juckeland G., Kluge T., Nagel W.E., Pausch R., Schmitt F., Schramm U., Schuchart J., Wiedera R. Radiative signatures of the relativistic Kelvin–Helmholtz instability // Proc. SC13: Int. Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis. New York: ACM Press, 2013. doi 10.1145/2503210.2504564.
23. Decyk V.K., Singh T.V. Particle-in-cell algorithms for emerging computer architectures // Computer Physics Communications. 2014. **185**, N 3. 708–719.
24. Taflov A. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method. London: Artech House, 1995.
25. Berenger J.-P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves // Journal of Computational Physics. 1994. **114**, N 2. 185–200.
26. Esirkepov T.Zh. Exact charge conservation scheme for particle-in-cell simulation with an arbitrary form-factor // Computer Physics Communications. 2001. **135**, N 2. 144–153.
27. Villasenor J., Buneman O. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers // Computer Physics Communications. 1992. **69**, N 2. 306–316.
28. Macchi A., Borghesi M., Passoni M. Ion acceleration by super-intense laser–plasma interaction // Reviews of Modern Physics. 2013. **85**, N 2. 751–793.
29. Wilks S.C., Langdon A.B., Cowan T.E., Roth M., Singh M., Hatchett S., Key M.H., Pennington D., MacKinnon A., Snavely R.A. Energetic proton generation in ultra-intense laser–solid interactions // Physics of Plasmas. 2001. **8**, N 2. 542–549.
30. Green J.S., Robinson A.P.L., Booth N., Carroll D.C., Dance R.J., Gray R.J., MacLellan D.A., McKenna P., Murphy C.D., Rusby D., Wilson L. High efficiency proton beam generation through target thickness control in femtosecond laser–plasma interactions // Appl. Phys. Letters. 2014. **104**, N 21. doi 10.1063/1.4879641.
31. Pae K.H., Choi I.W., Hahn S.J., Cary J.R., Lee J. Proposed hole-target for improving maximum proton energy driven by a short intense laser pulse // Physics of Plasmas. 2009. **16**, N 7. doi 10.1063/1.3174434.
32. Sung J.H., Lee S.K., Yu T.J., Jeong T.M., Lee J. 0.1 Hz 1.0 PW Ti:sapphire laser // Opt. Lett. 2010. **35**, N 18. 3021–3023.
33. Pipahl A., Anashkina E.A., Toncian M., Toncian T., Skobelev S.A., Bashinov A.V., Gonoskov A.A., Willi O., Kim A.V. High-intensity few-cycle laser-pulse generation by the plasma-wakefield self-compression effect // Phys. Rev. E. 2013. **87**. doi 10.1103/PhysRevE.87.033104.
34. Абрамян Л.А., Литвак А.Г., Миронов В.А., Сергеев А.М. Самофокусировка и релятивистское каналирование ультракороткого лазерного импульса в плазме // ЖЭТФ. 1992. **102**, № 6. 1816–1824.
35. Bell A.R., Kirk J.G. Possibility of prolific pair production with high-power lasers // Phys. Rev. Lett. 2008. **101**. doi 10.1103/PhysRevLett.101.200403
36. Bashinov A.V., Gonoskov A.A., Kim A.V., Mourou G., Sergeev A.M. New horizons for extreme light physics with mega-science project XCELS // Eur. Phys. J. Special Topics. 2014. **223**, N 6. 1105–1112.
37. Gonoskov A., Bashinov A., Gonoskov I., Harvey C., Ilderton A., Kim A., Marklund M., Mourou G., Sergeev A. Anomalous radiative trapping in laser fields of extreme intensity // Phys. Rev. Lett. 2014. **113**, N 1. doi 10.1103/PhysRevLett.113.014801.

Поступила в редакцию
22.08.2015

Three-Dimensional Particle-in-Cell Plasma Simulation on Intel Xeon Phi: Performance Optimization and Case Study

I. B. Meyerov¹, S. I. Bastrakov², I. A. Surmin³,

A. A. Gonoskov⁴, E. S. Efimenko⁵, A. V. Bashinov⁶,
 A. V. Korzhimanov⁷, A. V. Larin⁸, A. A. Muraviev⁹,
 A. I. Rozanov¹⁰, and M. R. Savichev¹¹

- ¹ Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; prospekt Gagarina 23, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Ph.D., Associate Professor, e-mail: meerov@vmk.unn.ru
- ² Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; prospekt Gagarina 23, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Junior Scientist, e-mail: bastrakov@vmk.unn.ru
- ³ Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; prospekt Gagarina 23, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Programmer, e-mail: i.surmin@gmail.com
- ⁴ Institute of Applied Physics, Russian Academy of Sciences; ulitsa Ul'yanova 46, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Ph.D., Scientist, e-mail: arkady.gonoskov@gmail.com
- ⁵ Institute of Applied Physics, Russian Academy of Sciences; ulitsa Ul'yanova 46, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Junior Scientist, e-mail: nnreene@mail.ru
- ⁶ Institute of Applied Physics, Russian Academy of Sciences; ulitsa Ul'yanova 46, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Junior Scientist, e-mail: abvk@inbox.ru
- ⁷ Institute of Applied Physics, Russian Academy of Sciences; ulitsa Ul'yanova 46, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Ph.D., Scientist, e-mail: korzhimanov.artem@gmail.com
- ⁸ Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; prospekt Gagarina 23, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Student, e-mail: larin.anton.vyacheslavovich@gmail.com
- ⁹ Institute of Applied Physics, Russian Academy of Sciences; ulitsa Ul'yanova 46, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Junior Scientist, e-mail: sashamur@gmail.com
- ¹⁰ Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; prospekt Gagarina 23, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Student, e-mail: rozantolya@mail.ru
- ¹¹ Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; prospekt Gagarina 23, Nizhni Novgorod, 603950, Russia; Student, e-mail: savimisha@gmail.com

Received August 22, 2015

Abstract: An efficient application of computational systems equipped with Intel Xeon Phi coprocessors for the laser-plasma simulation is considered. The features of Xeon Phi architecture that influence the performance of Particle-in-Cell plasma simulation are analyzed. The PICADOR parallel plasma simulation code previously optimized for Xeon Phi is described. Its performance on Xeon Phi compared to CPU is studied on three computationally intensive plasma simulation problems. The ratio of computational time on Xeon Phi to CPU is discussed for the main stages of the Particle-in-Cell method. It is shown that, depending on the features of a physical problem, the use of Xeon Phi can be both advantageous and disadvantageous compared to CPU.

Keywords: plasma physics, particle-in-cell method, high-performance computing, Xeon Phi, performance optimization.

References

1. C. K. Birdsall and A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation* (McGraw-Hill, New York, 1985; Energoatomizdat, Moscow, 1989).
2. R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles* (McGraw-Hill, New York, 1981).
3. D. Tskhakaya, "The Particle-in-Cell Method," in *Lecture Notes in Physics* (Springer, Heidelberg, 2008), Vol. 739, pp. 161–189.
4. V. P. Tarakanov, *User's Manual for Code KARAT* (Berkley Research Associates, Springfield, 1992).
5. D. V. Romanov, V. Yu. Bychenkov, W. Rozmus, et al., "Self-Organization of a Plasma due to 3D Evolution of the Weibel Instability," *Phys. Rev. Lett.* **93** (21), 215004-1–215004-4 (2004).
6. K. I. Popov, V. Yu. Bychenkov, W. Rozmus, et al., "Vacuum Electron Acceleration by Tightly Focused Laser Pulses with Nanoscale Targets," *Phys. Plasmas* **16** (5), 053106-1–053106-9 (2009).

7. E. N. Nerush and I. Kostyukov, "Carrier-Envelope Phase Effects in Plasma-Based Electron Acceleration with Few-Cycle Laser Pulses," *Phys. Rev. Lett.* **103** (3), 035001-1–035001-4 (2009).
8. M. A. Kraeva and V. E. Malyshkin, "Assembly Technology for Parallel Realization of Numerical Models on MIMD-Multicomputers," *Future Gener. Comput. Syst.* **17** (6), 755–765 (2001).
9. E. A. Berendeev, A. V. Ivanov, G. G. Lazareva, and A. V. Snytnikov, "Supercomputer Simulation of Plasma Electron Dynamics in a Magnetic Trap with Inverse Magnetic Mirrors and Multipole Magnetic Walls," *Vychisl. Metody Programm.* **14**, 149–154 (2013).
10. A. Yu. Perepelkina, V. D. Levchenko, and I. A. Goryachev, "3D3V Kinetic Code CFHall for Magnetized Plasma Simulation," *Mat. Model.* **25** (11), 98–110 (2013).
11. R. A. Fonseca, J. Vieira, F. Fiuza, et al., "Exploiting Multi-Scale Parallelism for Large Scale Numerical Modelling of Laser Wakefield Accelerators," *Plasma Phys. Control. Fusion* **55** (12), 124011-1–124011-9 (2013).
12. A. Pukhov, "Three-Dimensional Electromagnetic Relativistic Particle-in-Cell Code VLPL (Virtual Laser Plasma Lab)," *J. Plasma Phys.* **61** (3), 425–433 (1999).
13. K. J. Bowers, B. J. Albright, L. Yin, et al., "Advances in Petascale Kinetic Plasma Simulation with VPIC and Roadrunner," *J. Phys.: Conf. Ser.* **180** (1) (2009). doi 10.1088/1742-6596/180/1/012055
14. H. Burau, R. Widera, W. Hönig, et al., "PICongPU: A Fully Relativistic Particle-in-Cell Code for a GPU Cluster," *IEEE Trans. Plasma Sci.* **33** (10), 2831–2839 (2010).
15. S. Bastrakov, R. Donchenko, A. Gonoskov, et al., "Particle-in-Cell Plasma Simulation on Heterogeneous Cluster Systems," *J. Comput. Sci.* **3** (6), 474–479 (2012).
16. S. Bastrakov, I. Meyerov, I. Surmin, et al., "Particle-in-Cell Plasma Simulation on CPUs, GPUs and Xeon Phi Coprocessors," in *Lecture Notes in Computer Science* (Springer, Heidelberg, 2014), Vol. 8488, pp. 513–514.
17. S. I. Bastrakov, I. B. Meyerov, I. A. Surmin, et al., "Dynamic Load Balancing in the PICADOR Plasma Simulation Code," *Vychisl. Metody Programm.* **14**, 67–74 (2013).
18. I. A. Surmin, S. I. Bastrakov, A. A. Gonoskov, et al., "Particle-in-Cell Plasma Simulation Using Intel Xeon Phi Coprocessors," *Vychisl. Metody Programm.* **15**, 530–536 (2014).
19. A. Gonoskov, S. Bastrakov, E. Efimenko, et al., "Extended Particle-in-Cell Schemes for Physics in Ultrastrong Laser Fields: Review and Developments," *Phys. Rev. E* **92** (2015). doi 10.1103/physreve.92.023305
20. I. A. Surmin, S. I. Bastrakov, E. S. Efimenko, et al., *Particle-in-Cell Laser-Plasma Simulation on Xeon Phi Coprocessors*, arXiv preprint: 1505.07271v1 [physics.comp-ph] (Cornell Univ. Library, Ithaca, 2015), available at <http://arxiv.org/abs/1505.07271v1>.
21. H. Nakashima, "Manycore Challenge in Particle-in-Cell Simulation: How to Exploit 1 TFlops Peak Performance for Simulation Codes with Irregular Computation," *Comput. Electr. Eng.* (in press). doi 10.1016/j.compeleceng.2015.03.010
22. M. Bussmann, H. Burau, T. E. Cowan, et al., "Radiative Signatures of the Relativistic Kelvin–Helmholtz Instability," in *Proc. Int. Conf. on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Denver, USA, November 17–21, 2013* (ACM Press, New York, 2013), doi 10.1145/2503210.2504564
23. V. K. Decyk and T. V. Singh, "Particle-in-Cell Algorithms for Emerging Computer Architectures," *Comput. Phys. Commun.* **185** (3), 708–719 (2014).
24. A. Taflove, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* (Artech House, London, 1995).
25. J.-P. Berenger, "A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves," *J. Comput. Phys.* **114** (2), 185–200 (1994).
26. T. Zh. Esirkepov, "Exact Charge Conservation Scheme for Particle-in-Cell Simulation with an Arbitrary Form-Factor," *Comput. Phys. Commun.* **135** (2), 144–153 (2001).
27. J. Villasenor and O. Buneman, "Rigorous Charge Conservation for Local Electromagnetic Field Solvers," *Comput. Phys. Commun.* **69** (2–3), 306–316 (1992).
28. A. Macchi, M. Borghesi, and M. Passoni, "Ion Acceleration by Superintense Laser–Plasma Interaction," *Rev. Mod. Phys.* **85** (2), 751–793 (2013).
29. S. C. Wilks, A. B. Langdon, T. E. Cowan, et al., "Energetic Proton Generation in Ultra-Intense Laser–Solid Interactions," *Phys. Plasmas* **8** (2), 542–549 (2001).
30. J. S. Green, A. P. L. Robinson, N. Booth, et al., "High Efficiency Proton Beam Generation through Target Thickness Control in Femtosecond Laser–Plasma Interactions," *Appl. Phys. Lett.* **104** (2014). doi 10.1063/1.4879641
31. K. H. Pae, I. W. Choi, S. J. Hahn, et al., "Proposed Hole-Target for Improving Maximum Proton Energy Driven by a Short Intense Laser Pulse," *Phys. Plasmas* **16** (2009). doi 10.1063/1.3174434

32. J. H. Sung, S. K. Lee, T. J. Yu, et al., “0.1 Hz 1.0 PW Ti:Sapphire Laser,” *Opt. Lett.* **35** (18), 3021–3023 (2010).
33. A. Pipahl, E. A. Anashkina, M. Toncian, et al., “High-Intensity Few-Cycle Laser-Pulse Generation by the Plasma-Wakefield Self-Compression Effect,” *Phys. Rev. E* **87** (2013). doi 10.1103/PhysRevE.87.033104
34. L. A. Abramyan, A. G. Litvak, V. A. Mironov, and A. M. Sergeev, “Self-Focusing and Relativistic Waveguiding of an Ultrashort Laser Pulse in a Plasma,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **102** (6), 1816–1824 (1992) [*J. Exp. Theor. Phys.* **75** (6), 978–982 (1992)].
35. A. R. Bell and J. G. Kirk, “Possibility of Prolific Pair Production with High-Power Lasers,” *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008). doi 10.1103/PhysRevLett.101.200403
36. A. V. Bashinov, A. A. Gonoskov, A. V. Kim, et al., “New Horizons for Extreme Light Physics with Mega-Science Project XCELS,” *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **223** (6), 1105–1112 (2014).
37. A. Gonoskov, A. Bashinov, I. Gonoskov, et al., “Anomalous Radiative Trapping in Laser Fields of Extreme Intensity,” *Phys. Rev. Lett.* **113** (2014). doi 10.1103/PhysRevLett.113.014801