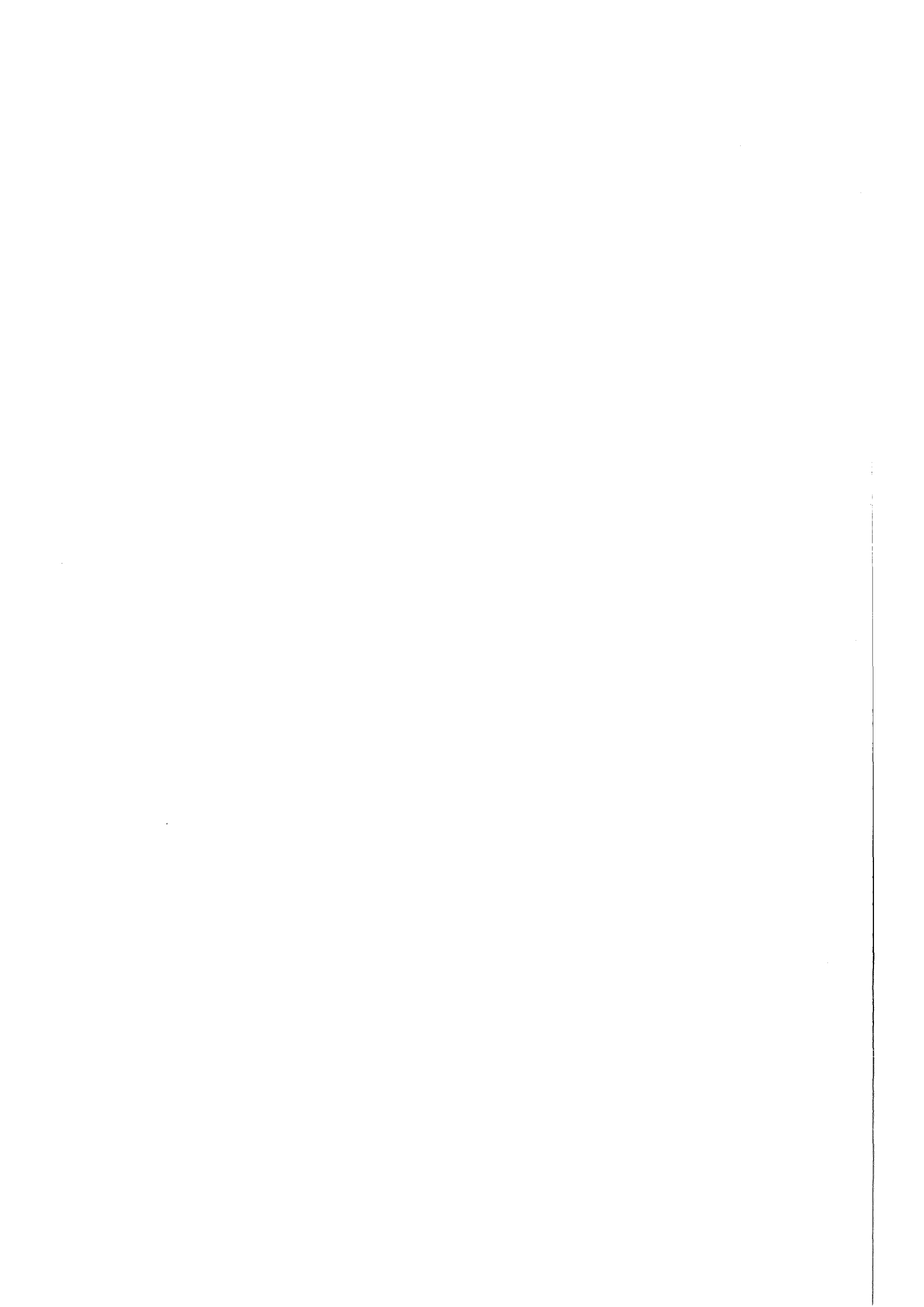


KfK 4638
März 1990

Abschlußbericht über das Vorhaben
Berechnung von 2D-Feldern
in Hochstromdioden und
Teilchensimulation in 2D-Plasmen
im Rahmen des SUPRENUM-Verbundprojekts

M. Alef, D. Seldner
Institut für Datenverarbeitung in der Technik

Kernforschungszentrum Karlsruhe



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
Institut für Datenverarbeitung in der Technik

KfK 4638

**Abschlußbericht über das Vorhaben
Berechnung von 2D-Feldern in Hochstromdioden
und Teilchensimulation in 2D-Plasmen
im Rahmen des SUPRENUM-Verbundprojekts**

Manfred Alef, David Seldner

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministers für Forschung und Technologie unter dem Förderkennzeichen ITR8502K/4 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

**Abschlußbericht über das Vorhaben
Berechnung von 2D-Feldern in Hochstromdioden
und Teilchensimulation in 2D-Plasmen
im Rahmen des SUPRENUM-Verbundprojekts**

Zusammenfassung:

Im Rahmen des vom BMFT finanziell geförderten SUPRENUM-Vorhabens wurden im Institut für Datenverarbeitung in der Technik (IDT) des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KfK) SUPRENUM-Versionen für Teile des Programmpakets BFCPIC zur Diodensimulation entwickelt.

Dazu wurden im Arbeitspaket 2D-DIO die Feldberechnungen und in 2D-PLAS die numerische Simulation der Bewegungen elektrisch geladener Teilchen in diesen Feldern parallelisiert.

Dieser Bericht enthält den Abschlußbericht für dieses Vorhaben zum Stichtag 31.12.1989 (Ende der BMFT-Förderung).

**Final Report of the Project
Computation of 2D Fields in High Voltage Diodes
and Particle Simulation in 2D Plasmas
as Part of the SUPRENUM Supercomputer Project**

Abstract:

As part of the SUPRENUM project funded by the German Federal Ministry for Research and Technology SUPRENUM versions were developed for parts of the BFCPIC program package for diode simulation. The work was carried out at the Institute for Data Processing in Technology at the Karlsruhe Nuclear Research Center.

The field computations were parallelized in the package 2D-DIO, and in 2D-PLAS the numerical simulation of the movements of electrically charged particles in these fields were parallelized.

This report contains the final report of this project as of the deadline December 31, 1989 (end of the project).

Inhalt:

1. Aufgabenstellung	1
2. Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde	3
3. Planung und Ablauf des Vorhabens	5
4. Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde ...	7
4.1 Angaben bekannter Konstruktionen, Verfahren und Schutzrechte, die für die Durchführung des Vorhabens benutzt wurden	9
4.2 Angabe der verwendeten Fachliteratur*) sowie der benutzten Informations- und Dokumentationsdienste	10
5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen	13
6. Erzielte Ergebnisse	15
6.1 Arbeitspaket 2D-DIO (Berechnung von 2D-Feldern in Hochstromdioden)	15
6.2 Arbeitspaket 2D-PLAS (Teilchensimulation in 2D-Plasmen)	24
7. Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse	31
8. Während der Durchführung des Vorhabens bekanntgewordener Fortschritt bei anderen Stellen	33
9. Erfolgte und geplante Veröffentlichungen *) der Ergebnisse	35

*) Verweise auf die verwendete Fachliteratur sind in der Form [Lxx],
Hinweise auf eigene Veröffentlichungen durch [Vxx] gekennzeichnet.

1. Aufgabenstellung

Ziel des Vorhabens war die Entwicklung von Programmen zur Lösung komplizierter physikalisch-technischer Modellierungsaufgaben auf einem Mehrprozessorrechner (SUPRENUM). Diese numerischen Berechnungen sollen die Konstruktion und Optimierung von selbstmagnetisch isolierten, rotationssymmetrischen Hochstrom-Ionendioden unterstützen.

Dazu wurden die folgenden Arbeitspakete definiert:

1. Arbeitspaket 2D-DIO

(Berechnung von 2D-Feldern in Hochstromdioden):

Berechnung elektro- und magnetostatischer Felder in axialsymmetrischen Dioden-Geometrien auf randangepaßten 2D-Gittern in (r,z) -Koordinaten.

2. Arbeitspaket 2D-PLAS

(Teilchensimulation in 2D-Plasmen):

Berechnung von Trajektorien elektrisch geladener Teilchen in der (r,z) -Ebene bei Vorgabe von elektromagnetischen Feldern auf einem randangepaßten Gitter, und Berechnung der resultierenden Ladungs- und Stromdichten.

Diese Arbeiten basieren auf dem (skalaren, zum Teil vektorisierten) Programmpaket BFCPIC [L27,L29,L30].

2. Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Zur numerischen Unterstützung der Entwicklung und Optimierung von selbstmagnetisch isolierten, rotationssymmetrischen Hochstrom-Ionendioden ist eine Vielzahl von Einzelläufen des Programmpakets BFCPIC mit jeweils geänderten Parametern erforderlich. Dieses Programm beruht auf der „Particle-in-Cell“-Methode [L11], mit der Vielteilchensysteme häufig behandelt werden.

Auf herkömmlichen Großrechnern sind diese Berechnungen mit zu hohen Rechenzeiten verbunden. Bereits ein Einzellauf erfordert mehrere Stunden. Derartige Rechenläufe können in der Regel nur nachts oder an Wochenenden durchgeführt werden, so daß die mittlere Antwortzeit in der Größenordnung mehrerer Tage liegt.

Für Produktionsläufe war deshalb eine drastische Beschleunigung der Programme erforderlich, wenn das Programmpaket für die Praxis von Nutzen sein soll. Dazu bieten sich prinzipiell die folgenden Möglichkeiten:

- Numerische Beschleunigung,
- Vektorisierung,
- Parallelisierung.

Die Möglichkeit zur numerischen Beschleunigung war insbesondere bei den Feldberechnungen gegeben (Anwendung von Mehrgittermethoden).

Vektorisierung war aus verschiedenen Gründen (teilweise sehr kurze Vektorenlängen, indirekte Adressierung) nur in geringem Maße möglich.

Dagegen besitzen die von uns angewendeten numerischen Simulationsverfahren eine natürliche Parallelität:

- Bei der Diskretisierung der den Feldberechnungen zugrundeliegenden Differentialgleichungen werden in jedem Gitterpunkt nur Funktionswerte aus den acht umliegenden Nachbarpunkten benötigt.
- In gegebenen Feldern kann die Berechnung der Teilchenfortbewegung für jedes Teilchen unabhängig von den anderen erfolgen.

Eine Parallelisierung dieser Programme, zusätzlich zur Vektorisierung und dem Einsatz von Mehrgittermethoden für die Feldberechnungen, erschien uns deshalb

als eine naheliegende Möglichkeit zur wesentlichen Beschleunigung der numerischen Rechnung. Da parallelarbeitende Programmsysteme für elektro-magnetisch wechselwirkende Vielteilchensysteme von anderer Seite nicht erhältlich waren, war eine Eigenentwicklung erforderlich.

3. Planung und Ablauf des Vorhabens

Das SUPRENUM-Vorhaben geht auf eine Initiative von Prof. Dr. U. Trottenberg zurück. Ziel war die Entwicklung eines besonders zur Durchführung umfangreicher numerischer Simulationsrechnungen in wissenschaftlich-technischen Aufgabenstellungen geeigneten Hochleistungsrechners [L26]. Die wesentlichen Merkmale waren:

- Parallelverarbeitung (MIMD-Prinzip: „Multiple instructions, multiple data“).
- Ausnutzung der „lokalen Struktur“ von Gitterproblemen, die eine sehr große und sehr wichtige Aufgabenklasse repräsentieren.
- Unterstützung des Mehrgitterprinzips zur numerischen Beschleunigung klassischer Gitterprobleme.

Dazu haben sich ca. 15 Partner aus Industrie, Universitäten und Großforschungseinrichtungen zusammengeschlossen, um einerseits die Hard- und Betriebssoftware, andererseits aber auch bereits ausgewählte Anwendungssoftware (Grundbibliotheken, repräsentative Anwenderprogramme) weitgehend gleichzeitig durchzuführen.

Das Vorhaben wurde zentral zunächst durch die Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (GMD), St. Augustin, später (ab Anfang 1986) durch die zu diesem Zweck gegründete SUPRENUM GmbH (Bonn) gesteuert. Dazu wurde ein Netzplan erarbeitet, in dem die bei den einzelnen Partnern durchzuführenden Arbeiten mit den entsprechenden Abhängigkeiten verzeichnet waren.

Zur Information und zum Erfahrungsaustausch wurden jährlich zwei Plenarsitzungen veranstaltet, an dem Vertreter aller Partner teilnahmen. Daneben wurden Arbeitskreise eingerichtet, die in kürzeren Abständen zusammenkamen.

Die Beteiligung des KfK bestand in der Parallelisierung der rechenintensivsten Module des Programmpakets BFCPIC zur Simulation gepulster Hochstrom-Ionendioden. Diese Arbeiten wurden ab Frühjahr 1986 im Institut für Datenverarbeitung in der Technik (IDT) durchgeführt.

Nach der Einarbeitung in die zugrundeliegende Numerik sowie in die SUPRENUM-Thematik wurden zunächst die vorliegenden skalaren Algorithmen überarbeitet, um deren numerische Eigenschaften zu verbessern (Anwendung des Mehrgitter-

prinzips bei der Feldberechnung [V04], Verbesserung des Verfahrens zur Interpolation der in Gitterpunkten vorliegenden Feldstärken auf die Teilchenorte [V01-V03]).

Anschließend wurden die Möglichkeiten zur Vektorisierung der Programme untersucht und auf vorhandenen Vektorrechnern getestet [V05,V06].

Gleichzeitig wurde mit Untersuchungen begonnen, welche Parallelisierungsstrategien eingesetzt werden können. Beim Arbeitspaket 2D-DIO (Berechnung von 2D-Feldern in Hochstromdioden) bestand die Wahl zwischen einer ein- oder einer zweidimensionalen Gebietsaufteilung [V10], während beim Arbeitspaket 2D-PLAS (Teilchensimulation in 2D-Plasmen) alternativ eine Gebietsaufteilung oder eine portionsweise Aufteilung der Simulationsteilchen zur Verfügung standen [V09].

Sodann wurde mit der Parallelisierung der Programme begonnen (Aufspaltung in parallel ausführbare Unterprogramme, Integration der Kommunikation) [V05-V13]. Dazu stand uns ein SUPRENUM-Simulator zur Verfügung, mit dem die parallelisierten Programme auf den im KfK vorhandenen Rechnern (IBM 3090, SIEMENS 7890) ausgetestet werden konnten.

In der letzten Phase wurden die Programme auf dem bei der SUPRENUM GmbH aufgestellten SUPRENUM-(Pre-)Prototyp implementiert und ausführlich dokumentiert [V14,V15].

Abschließende Produktionsläufe mit genauer Zeitmessung, und etwaige sich daraus ergebende Feinkorrekturen an den Programmen, waren infolge der verzögerten Fertigstellung des endgültigen, den Planungen entsprechenden SUPRENUM-Rechners bis zum Stichtag dieses Berichts (31.12.1989) noch nicht möglich. Es ist geplant, diese Läufe nach Verfügbarkeit des Rechners nachzuholen.

4. Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Die in diesem Bericht beschriebenen Arbeiten basieren auf dem im KfK entwickelten, zweidimensionalen (rotationssymmetrischen), elektro- und magnetostatischen Programmpaket BFCPIC [L29,L30]. Darin werden die in den Dioden ablaufenden physikalischen Vorgänge numerisch mittels der sogenannten „Particle-in-Cell“-Methode (PIC) [L02,L11] für stationäre Probleme simuliert. Durch die Einführung randangepaßter Koordinaten (boundary-fitted coordinates - BFC) [L24] ist dieses Programm sehr flexibel hinsichtlich der Beschreibung der zu untersuchenden technischen Geometrien und hat daher auch bei ausländischen Gruppen Beachtung gefunden, die schon länger auf diesem Gebiet arbeiten.

Das Programm zeichnet sich dadurch aus, daß es auch Probleme behandeln kann, bei denen es auf Details der elektrischen Feldstärke in der Nähe von Elektroden ankommt.

In BFCPIC werden innerhalb einer Zeitschleife die elektro- und magnetostatischen Felder in den Punkten eines vorgegebenen Berechnungsgitters berechnet. Gemäß den an den Elektroden herrschenden Feldern werden dort neue Teilchen erzeugt. Anschließend werden die Felder in dem ganzen Berechnungsgebiet auf die Teilchenorte interpoliert. Durch die Felder sind die auf die Teilchen wirkenden Kräfte gegeben. Durch Lösen der Lorentzgleichung werden die neuen Phasenraumkoordinaten berechnet. Aus den neuen Teilchenorten und -geschwindigkeiten werden schließlich die Ladungs- und die Stromdichten in den Gitterpunkten bestimmt, aus denen im nächsten Zeitschritt wiederum neue Felder berechnet werden, bis ein stationärer Zustand erreicht ist.

In Abb. 4.0 ist die Zeitschleife schematisch dargestellt.

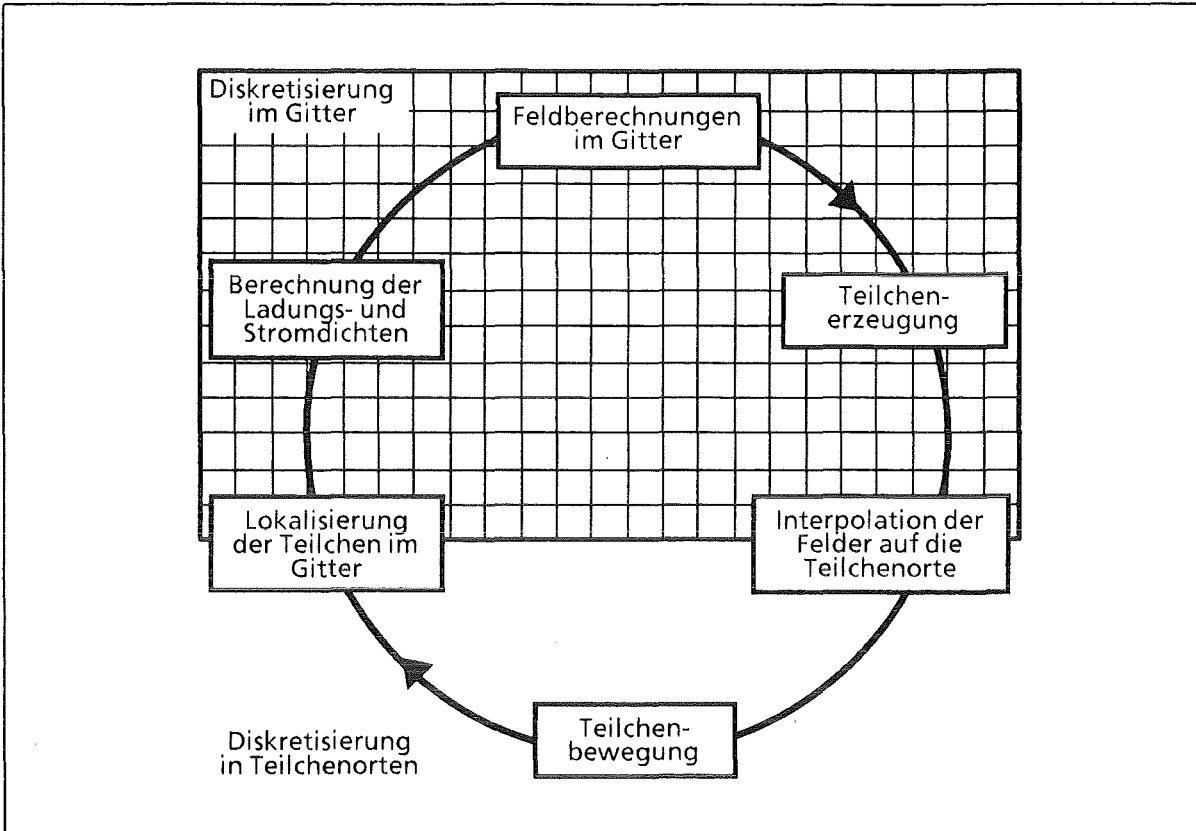


Abb. 4.0: Zeitschleife des BFCPIC-Codes und zugrundeliegende Diskretisierung.

4.1 Angaben bekannter Konstruktionen, Verfahren und Schutzrechte, die für die Durchführung des Vorhabens benutzt wurden

Feldberechnungen:

- Zur skalaren Beschleunigung der Berechnung elektrostatischer Potentiale wurde das Mehrgitterprinzip angewendet [L04,L07,L08,L21,L25].
- Die Parallelisierung dieser Berechnungen basiert auf einer geeigneten Aufteilung des Rechengebiets in Teilgebiete mit möglichst gleichgroßem Rechenaufwand [L19,L22,L23].

Teilchenbehandlung:

Für die Interpolation der Felder auf die Teilchenorte wird eine Erweiterung der „Area-Weighting“-Methode [V01-V03] verwendet. Zur Lösung der Lorentz-Gleichung wird eine „Leap-frog“-Diskretisierung zusammen mit dem Buneman-Algorithmus eingesetzt [L03,L28]. Die Berechnung der Ladungs- und Stromdichten erfolgt durch eine Verteilung der Teilchendaten auf die Gitterpunkte.

Die Parallelisierung dieser Module geschieht mittels einer gleichmäßigen Aufteilung der Teilchen auf die Prozesse.

4.2 Angabe der verwendeten Fachliteratur sowie der benutzten Informations- und Dokumentationsdienste *)

- [L01] B. Bartel, H. Ehrler, E. Halter:
Unveröffentlichter Bericht, KfK, April 1987
- [L02] C.K. Birdsall, A.B. Langdon:
Plasma Physics via Computer Simulations.
McGraw-Hill, 1985
- [L03] J.P. Boris:
Relativistic Plasma Simulation – Optimization of a Hybrid Code.
Proc. 4th Conf. on Num. Sim. of Plasmas, Washington (1970), S. 3-67
- [L04] A. Brandt:
Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary-Value Problems.
Mathematics of Computation Vol. 31 Nr. 138 (1977), S. 333-390
- [L05] O. Buneman:
Time-Reversible Difference Procedures.
J. Comp. Phys. 1 (1967), S. 517-535
- [L06] B.L. Buzbee:
Applications of MIMD Machines.
In: Vector and Parallel Processors in Computational Sciences,
Proc. of the 2nd Conf. held at Oxford, 28.-31.8.1984, Computer Physics
Communications 37 (1985), S. 1-5
- [L07] W. Hackbusch:
Multi-Grid Methods and Applications.
Springer Series in Computational Mathematics Vol. 4, Springer-Verlag,
1985
- [L08] W. Hackbusch, U. Trottenberg (Hrsg.):
Multigrid Methods.
Lecture Notes in Math. 960, Springer-Verlag (1982), S. 614-630
- [L09] E. Halter:
Die Berechnung elektrostatischer Felder in Pulsleistungsanlagen.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4072, April 1986
- [L10] R. Hempel, A. Schüller:
Vereinheitlichung und Portabilität paralleler Anwendersoftware durch
Verwendung einer Kommunikationsbibliothek.
Arbeitspapiere der GMD 234, St. Augustin, November 1986
- [L11] R.W. Hockney, J.W. Eastwood:
Computer Simulation Using Particles.
McGraw-Hill, 1981
- [L12] T. Hoshino, R. Hiromoto, S. Sekiguchi, S. Majima:
Mapping Schemes of the Particle-in-Cell Method Implemented on the
PAX Computer.
Parallel Computing 9 (1988), S. 53-75

*) Eine Aufstellung der eigenen Veröffentlichungen zu diesem Vorhaben ([Vxx]) befindet sich am Ende dieses Berichts (Kapitel 9).

- [L13] R. Huff, J. Dawson:
Particle Simulation on the NCUBE Concurrent Multiprocessor.
13th Conference on the Numerical Simulation of Plasmas,
Sante Fé, NM (USA), Sept. 1989, PMA 8
- [L14] M. Lemke:
Erfahrungen mit Mehrgitterverfahren für Helmholtz-ähnliche Probleme
auf Vektorrechnern und Mehrprozessor-Vektorrechnern.
Arbeitspapiere der GMD 278, St. Augustin, Dezember 1987
- [L15] P. Liewer, V. Decyk:
A General Concurrent Algorithm for Plasma Particle-in-Cell Simulation
Codes.
J. Comp. Phys. 85 (1989), S. 302-322
- [L16] O. Lubeck, V. Faber:
Modeling the Performance of Hypercubes: A Case Study Using the
Particle-in-Cell Application.
Parallel Computing 9 (1988/89), S. 37-52
- [L17] O. Kolp:
Optimal Color Relaxations for Parallel Systems.
Proc. of the Int. Conf. Parallel Computing, Leiden, 1989
- [L18] O. Kolp, H. Mierendorff:
Performance Estimations for SUPRENUM Systems.
In [L26]
- [L19] O.A. McBryan, E.F. van de Velde:
The Multigrid Method on Parallel Processors.
Lecture Notes in Mathematics 1228: Multigrid Methods II
(W. Hackbusch, U. Trottenberg, Hrsg.), Springer-Verlag (1982), S. 232-260
- [L20] H. Mierendorff, U. Trottenberg:
Performance Estimations for SUPRENUM Systems.
Proc. UNICOM Seminar on Evaluating Supercomputers, 1.-3. Juni 1988,
London
- [L21] S. Ohring:
Application of the Multigrid Method to Poisson's Equation in Boundary-
Fitted Coordinates.
J. Comp. Phys. 50 (1983), S. 307-315
- [L22] K. Solchenbach:
Grid Applications on Distributed Memory Architectures:
Implementation and Evaluation.
In [L26]
- [L23] K. Solchenbach, C.-A. Thole, U. Trottenberg:
Parallel Multigrid Methods: Implementation on SUPRENUM-Like
Architectures and Applications.
SUPRENUM Report Nr. 4, SUPRENUM GmbH, Bonn, August 1987
- [L24] J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi, C.W. Mastin:
Boundary-Fitted Coordinate Systems for Numerical Solution of Partial
Differential Equations - A Review.
J. Comp. Phys. 47 (1982), S. 1-108
- [L25] U. Trottenberg:
Schnelle Lösung elliptischer Differentialgleichungen nach dem
Mehrgitterprinzip.
Arbeitspapiere der GMD 40, St. Augustin, Juli 1983

- [L26] U. Trottenberg (Hrsg.):
Proceedings of the 2nd International SUPRENUM Colloquium
"Supercomputing Based on Parallel Computer Architectures".
Parallel Computing 7, 1988
- [L27] T. Westermann:
Modelling and Simulation of a Diode Relevant for Physical Research.
XIII th IMACS World Congress on Scientific Computing, Paris,
18.-22.7.1988, Band III, S. 241-243
- [L28] T. Westermann:
Teilchen-Fortbewegung in elektro-magnetischen Feldern.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4325, Januar 1988
- [L29] T. Westermann:
A Particle-in-Cell Method as a Tool for Diode Simulations.
Nucl. Instr. Meth. A263 (1988), S. 271-279
- [L30] T. Westermann:
Numerische Simulationen von technisch relevanten Ionen-Dioden mit der
Particle-in-Cell Methode.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4510, Januar 1989
- [L31] T. Westermann:
Methodology of the BFCPIC Code based on Boundary-Fitted Coordinates
and its Application to Ion Diodes.
Proc. 13th Conference on the Numerical Simulation of Plasmas,
Santa Fé, New Mexico, 17.-20.9.1989, IM3

Verschiedene Literaturrecherchen wurden über das Fachinformationszentrum
Energie, Physik, Mathematik GmbH Karlsruhe beschafft.

5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Die Arbeiten wurden im Rahmen eines von der SUPRENUM GmbH, Bonn, koordinierten Verbundvorhabens durchgeführt. Während der regelmäßig stattfindenden Sitzungen (Plenarsitzungen, Arbeitskreis Anwendungssoftware) bestand Gelegenheit zum Erfahrungsaustausch mit anderen Projektpartnern.

Die hauptsächlichen Themen waren in der Anfangszeit die Konzeption und Parallelisierung der Mehrgittermethoden (Diskussionen vor allem mit GMD, Universität Düsseldorf und SUPRENUM GmbH), später die Implementierung auf dem SUPRENUM-(Pre-)Prototyp in Zusammenarbeit mit der SUPRENUM GmbH.

Zum Testen der parallelisierten Programme stand uns auf den im KfK vorhandenen Großrechnern ein SUPRENUM-Simulator zur Verfügung, der von der GMD bzw. der SUPRENUM GmbH implementiert und gewartet wurde.

Innerhalb des KfK haben wir eng mit dem Entwickler des Programmpakets BFCPIC zusammengearbeitet.

6. Erzielte Ergebnisse

6.1 Arbeitspaket 2D-DIO (Berechnung von 2D-Feldern in Hochstromdioden)

Inhalt des Arbeitspakets 2D-DIO war die Entwicklung von Programmen zur parallelen Berechnung elektro- und magnetostatischer Felder in einem vorgegebenen, randangepaßten Gitter (vgl. Kapitel 4, Abb. 4.0).

Eingabedaten sind das Gitter und die Ladungs- und Stromdichten in den Gitterpunkten (s. Arbeitspaket 2D-PLAS, Abschnitt 6.2), Ausgabedaten die berechneten Feldstärken.

Elektrostatische Felder

In diesem Arbeitspaket wurde zunächst das als Ausgangsbasis vorliegende skalare Programm PSOR zur Berechnung elektrostatischer Potentiale [L09,L01] überarbeitet. In diesem Programm werden die das Potential beschreibende Poisson-Gleichung sowie geeignete Randbedingungen in randangepaßten Koordinaten diskretisiert und das so definierte lineare Gleichungssystem mittels des SOR-Verfahrens („successive overrelaxation“) gelöst. Ausgehend von diesen Diskretisierungen wurde das SOR-Verfahren durch einen Mehrgitteralgorithmus ersetzt [L04,L07,L08,L14,L19,L21,L22,L23,L25,L26;V04,V10].

Aufgrund der bei ausführlichen Testrechnungen gewonnenen Erfahrungen wurden zur Verbesserung sowohl der numerischen Eigenschaften als auch der Vektorisierbarkeit und Parallelisierbarkeit die Diskretisierungen modifiziert [V04]. Unter anderem wurde eine neue Diskretisierung für die Symmetrieachse eingeführt, welche die dort vorhandene Ladungsdichte berücksichtigt. Die Randbedingungen wurden so diskretisiert, daß nur noch Funktionswerte aus den acht unmittelbaren Nachbarpunkten benötigt werden; dadurch werden einerseits Abfragen in den innersten Schleifen sowie Rekursionen (bei Verwendung des unten beschriebenen Relaxationsschemas) weitestgehend vermieden, und bei der Parallelisierung reichen Überlappungsbereiche an den Grenzen zwischen Nachbarprozessen von nur jeweils einer Gitterlinie aus (s. Abb. 6.1.1).

Die Parallelisierung dieses Programms für SUPRENUM basiert auf einer Aufteilung des Rechengebiets in Teilgebiete, die jeweils ungefähr die gleiche Anzahl von

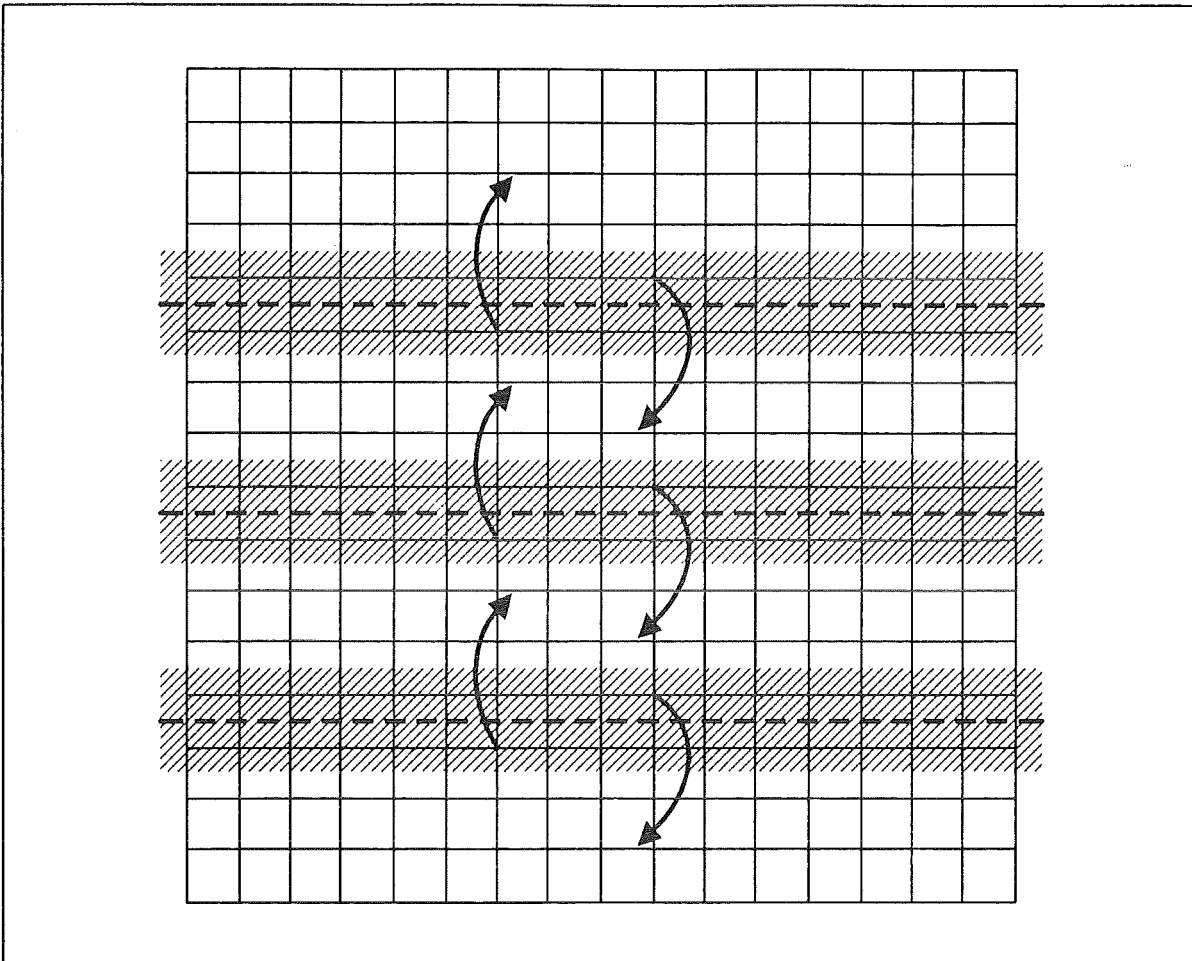


Abb. 6.1.1: Eindimensionale Gebietsaufteilung in „Streifen“.

Gitterpunkten enthalten. Die günstigste Lösung ist die Aufteilung in nur einer Dimension in „Streifen“, die eine feste Anzahl paralleler Gitterlinien umfassen (Abb. 6.1.1). Dadurch wird gegenüber einer zweidimensionalen Aufteilung der Kommunikationsaufwand verringert, und wegen der größeren Vektorlängen ergibt sich eine effizientere Vektorisierung. Andererseits wird zwar der mögliche Parallelisierungsgrad eingeschränkt, da bei einer zweidimensionalen Aufteilung kleinere Teilgebiete möglich sind. Eine so feine Parallelisierung wäre jedoch wegen des sehr hohen Kommunikationsanteils ineffizient.

Bei der Durchführung von Mehrgittermethoden erfordert die Relaxation (zur Fehlerglättung) den höchsten Rechenaufwand. Die Diskretisierung der Poisson-Gleichung führt wegen der in randangepaßten Koordinaten zu berücksichtigenden gemischten partiellen Ableitungen zu einem 9-Punkte-Stern. Deshalb wird ein sog. „Vier-Farb“-Relaxationsschema (Abb. 6.1.2) angewendet [L21]. Dabei werden zunächst alle Punkte der „Farbe 1“, dann die Punkte „2“, „3“ und zuletzt „4“ durchlaufen. Weil die Diskretisierungen nur auf die unmittelbaren Nachbar-

punkte zugreifen, sind die Berechnungen in allen Gitterpunkten derselben Farbe voneinander unabhängig und deshalb parallel ausführbar.

Während der Relaxation benötigt jeder parallele Prozeß gewisse Zwischenergebnisse der Nachbarprozesse (s. schraffierte Bereiche in Abb. 6.1.1). Diese Daten sind nach jeder Änderung per Nachrichtenaustausch (Pfeile in Abb. 6.1.1) zu aktualisieren. Um den durch diese Kommunikation bedingten zusätzlichen Aufwand möglichst gering zu halten, wurde die Reihenfolge, in der die vier Punktarten durchlaufen werden, so modifiziert, daß ein Datenaustausch nur nach jedem zweiten Relaxations-Teilschritt erforderlich ist (Abb. 6.1.2).

Bei den innerhalb des Mehrgitterverfahrens verwendeten groben Gittern kann es bei der oben beschriebenen Gebietsaufteilung vorkommen, daß einige Prozesse nur noch jeweils genau eine Gitterlinie zu bearbeiten haben. Infolge der speziellen Relaxationsreihenfolge kann dann nur noch höchstens die Hälfte dieser Prozesse gleichzeitig arbeiten, während die anderen auf Zwischenergebnisse warten, und umgekehrt (Abb. 6.1.3). In diesem Fall kann die Effizienz dadurch gesteigert werden, daß die Berechnungen bei Erreichen dieser Gitterfeinheitsstufe paarweise in jeweils einem Prozeß vereinigt werden; die verbleibenden Prozesse besitzen also noch mindestens zwei Gitterlinien („Agglomeration“, s. Abb. 6.1.4). Dadurch wird bei gleichbleibender Auslastung der Prozesse die Anzahl der auszutauschenden Nachrichten verringert.

Während der Behandlung der größten Gitter ist unter Umständen sogar eine noch weitergehende Zusammenfassung von Prozessen sinnvoll, so daß die größten Gitter von nur noch einem einzigen Prozeß bearbeitet werden (Abb. 6.1.5).

Eine Abschätzung für die auf 16 (1 Cluster) oder 256 Knoten des SUPRENUM-Rechners zu erwartende Mehrprozessor-Effizienz ist in Abb. 6.1.7 für die möglichen Typen von Mehrgitter-Zyklen (V-, W- oder F-Zyklen, s. Abb. 6.1.6) dargestellt; diese ist definiert durch

$$E(P) = T(1) / (P * T(P)),$$

wobei P die Anzahl der verwendeten Knotenrechner und $T(p)$ die auf p Knotenrechnern benötigte Rechenzeit ist [L06]. An dieser Stelle sei angemerkt, daß die oben beschriebene, hinsichtlich des Kommunikationsaufwandes optimierte Relaxationsreihenfolge bei den von uns gewählten Diskretisierungen keinen meßbaren Einfluß auf die Konvergenzgeschwindigkeit des Mehrgitterverfahrens hat, d.h. $E(P)$ gibt die echte Beschleunigung des parallelisierten Programms gegenüber dem skalaren Originalprogramm an.

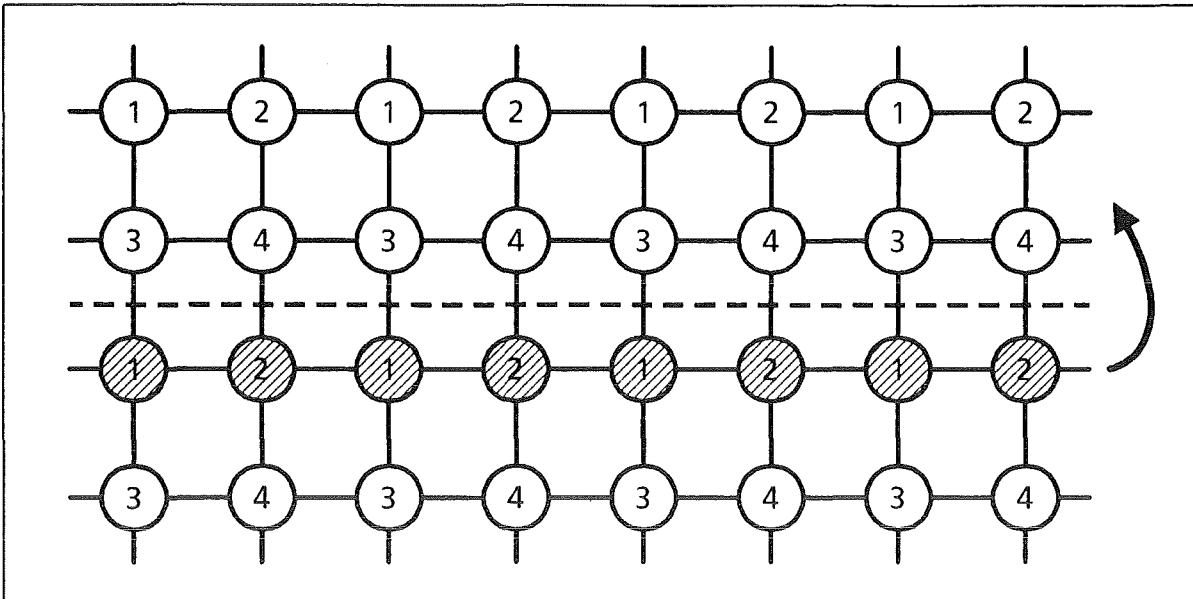


Abb. 6.1.2: „Vier-Farb“-Relaxationsschema mit minimierter Kommunikation: die schraffierten Kreise kennzeichnen den nach dem 2. Relaxations-Teilschritt vom unteren an den oberen Prozeß zu sendenden Datensatz.

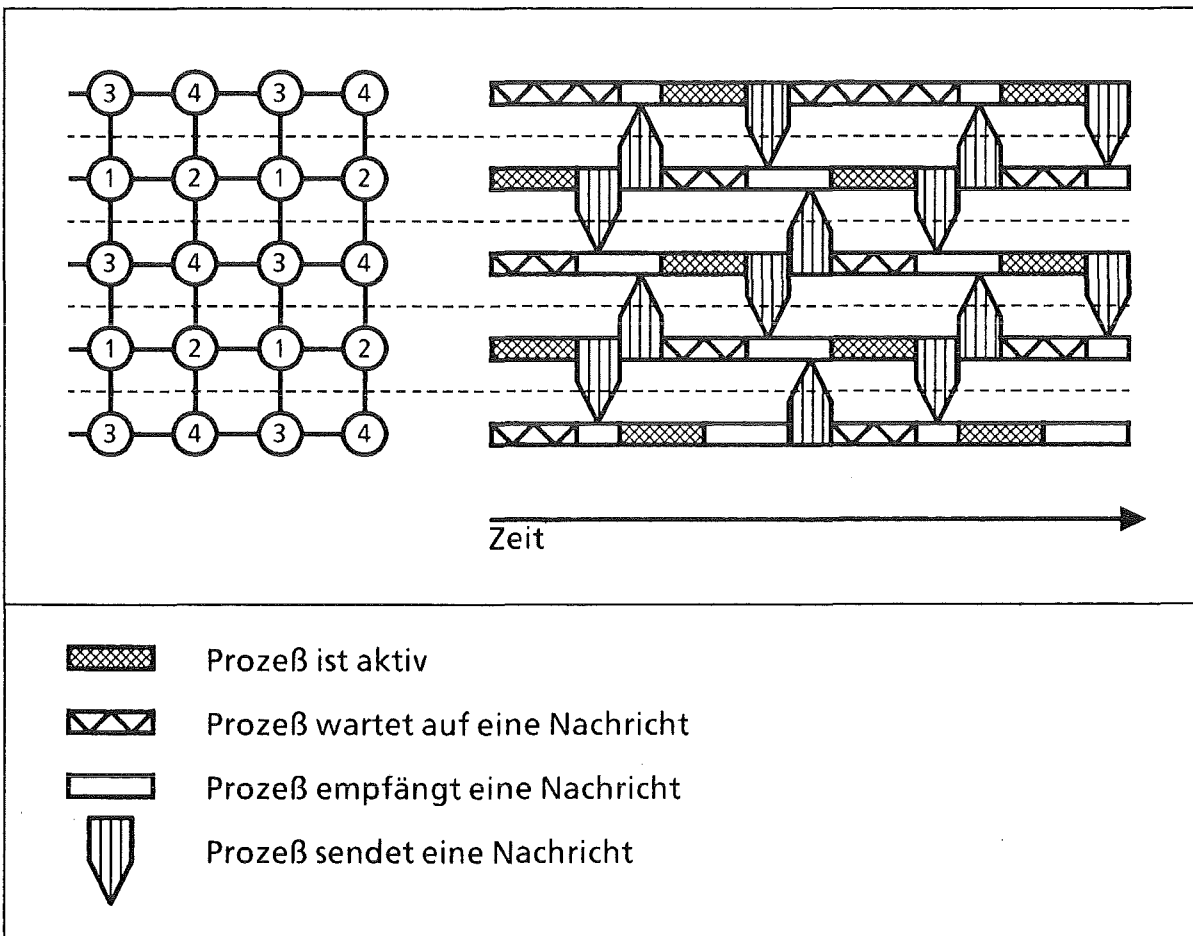


Abb. 6.1.3: Erhöhter Kommunikationsaufwand und ungünstige Prozeß-Auslastung, wenn die Prozesse auf einer bestimmten Gitterfeinheitsstufe nur noch je eine Gitterlinie bearbeiten; Abhilfe: Agglomeration, s.u.

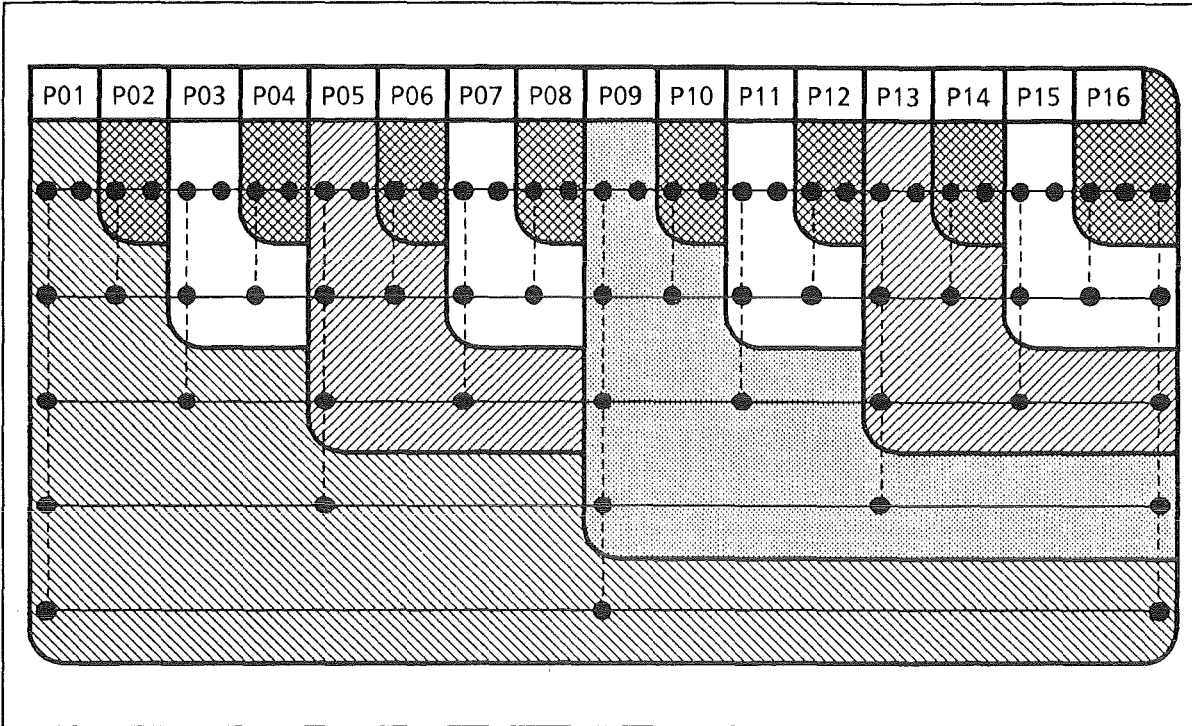


Abb. 6.1.4: Standard-Agglomerationsschema zur Vermeidung von Streifenbreiten mit weniger als zwei Gitterlinien (am Beispiel von 16 Knotenprozessen P01 - P16); jeder Punkt (●) repräsentiert eine Gitterlinie, jede waagerechte Linie (●—●—●) eine Gitterfeinheitsstufe.

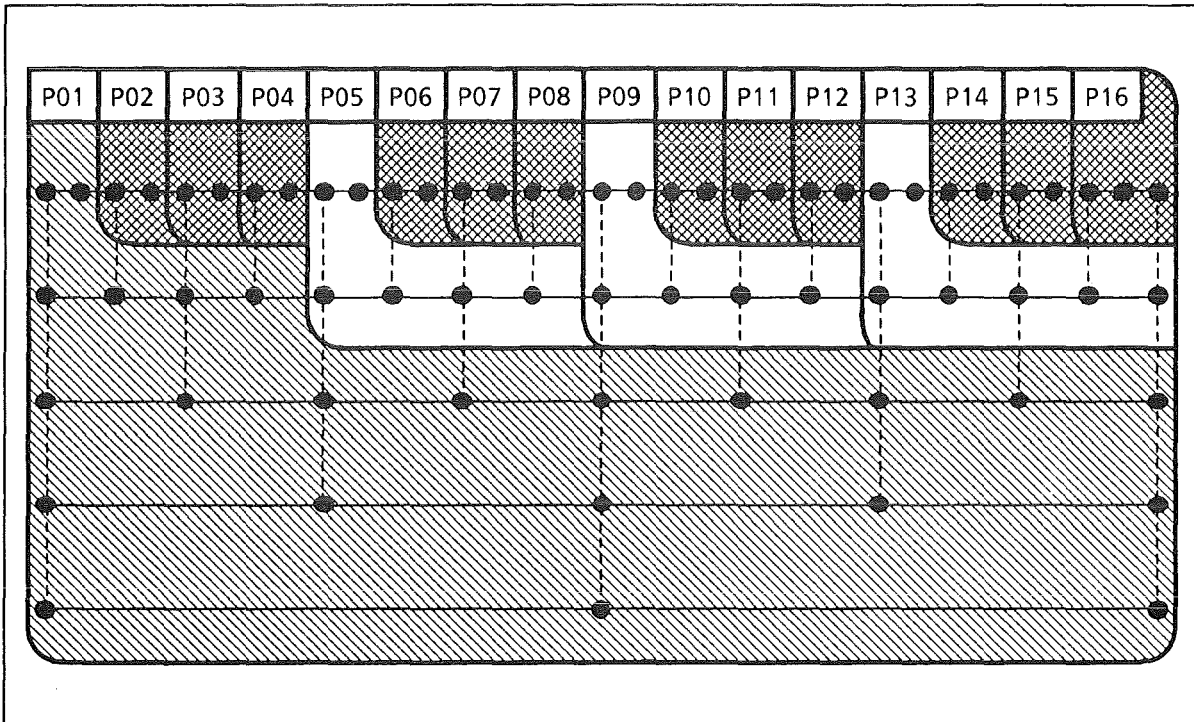


Abb. 6.1.5: Erweitertes Agglomerationsschema für die größten Gitter (Prinzip). Die drei größten Gitter werden ausschließlich vom Prozeß P01 bearbeitet. Das viertgrößte Gitter wird bereits auf vier, das fünftgrößte auf 16 Prozesse aufgeteilt. Vgl. die Legende zu Abb. 6.1.4.

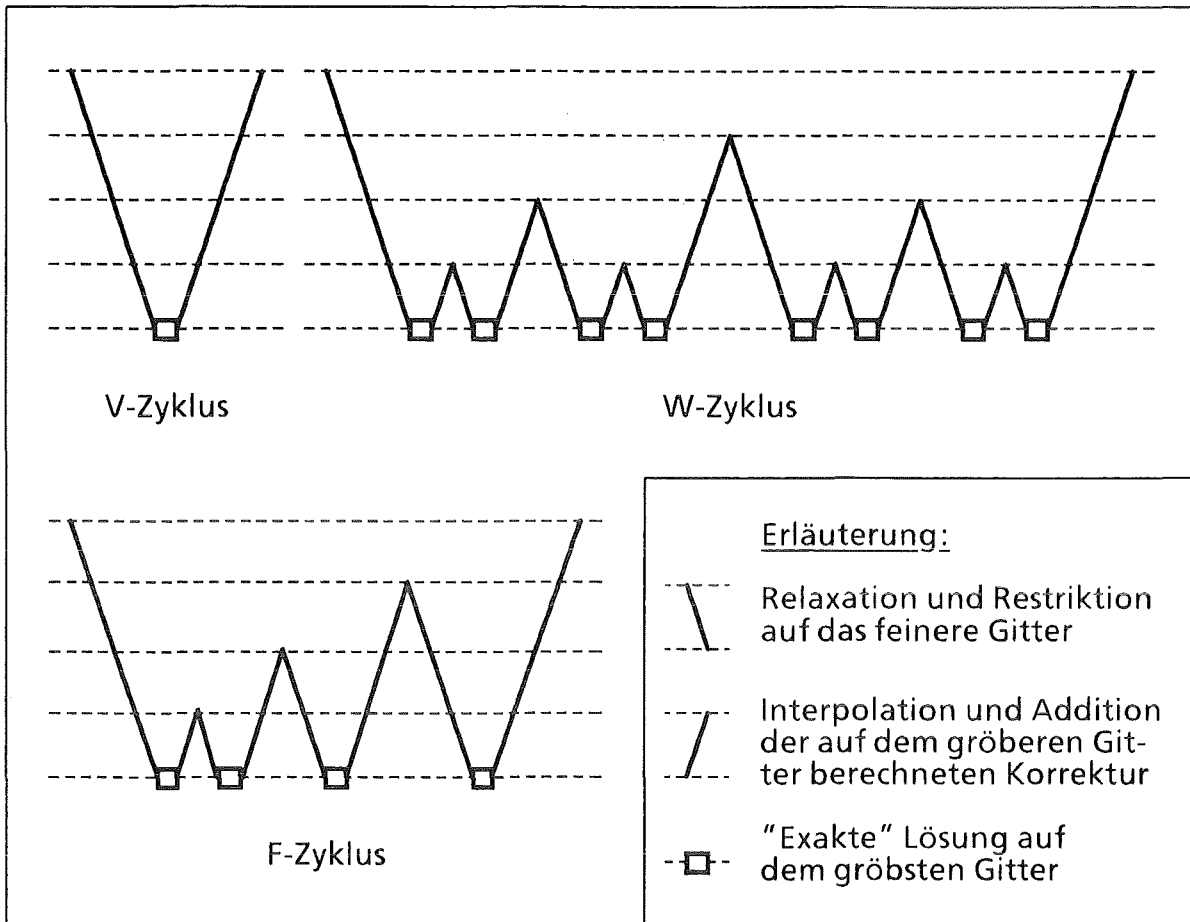


Abb. 6.1.6: In den Programmen auswählbare Mehrgitter-Zyklastypen.

Die zu erwartenden Rechengeschwindigkeiten sind in Abb 6.1.8 wiedergegeben. Der in Abhängigkeit von der Anzahl der benutzten Knotenrechner theoretisch mögliche Grenzwert ist zum Vergleich jeweils durch eine gestrichelte Linie markiert; dabei ist bereits berücksichtigt, daß in den hier beschriebenen Programmen so gut wie keine Vektorausdrücke der Form

$$A(1:N) = B(1:N) + S * C(1:N)$$

(Triaden mit jeweils einer Vektor- und einer Skalaroperation) vorkommen, bei denen beide Vektoreinheiten jedes Knotens zugleich arbeiten können, wodurch die doppelte Geschwindigkeit erzielt würde.

Eine ausführlichere Beschreibung der Parallelisierungskonzepte (mit Abschätzung der Parallelisierungseffizienz [L18,L20]) ist in [V10] enthalten.

Für dieses Programmpaket wurden mehrere Aufruf-Schnittstellen entworfen, die je nach den Bedürfnissen des Benutzers verwendet werden können. Diese unterscheiden sich in Umfang der berechneten Daten (wahlweise das elektrostatische Potential oder die daraus durch numerische Differentiation abgeleiteten Feldstär-

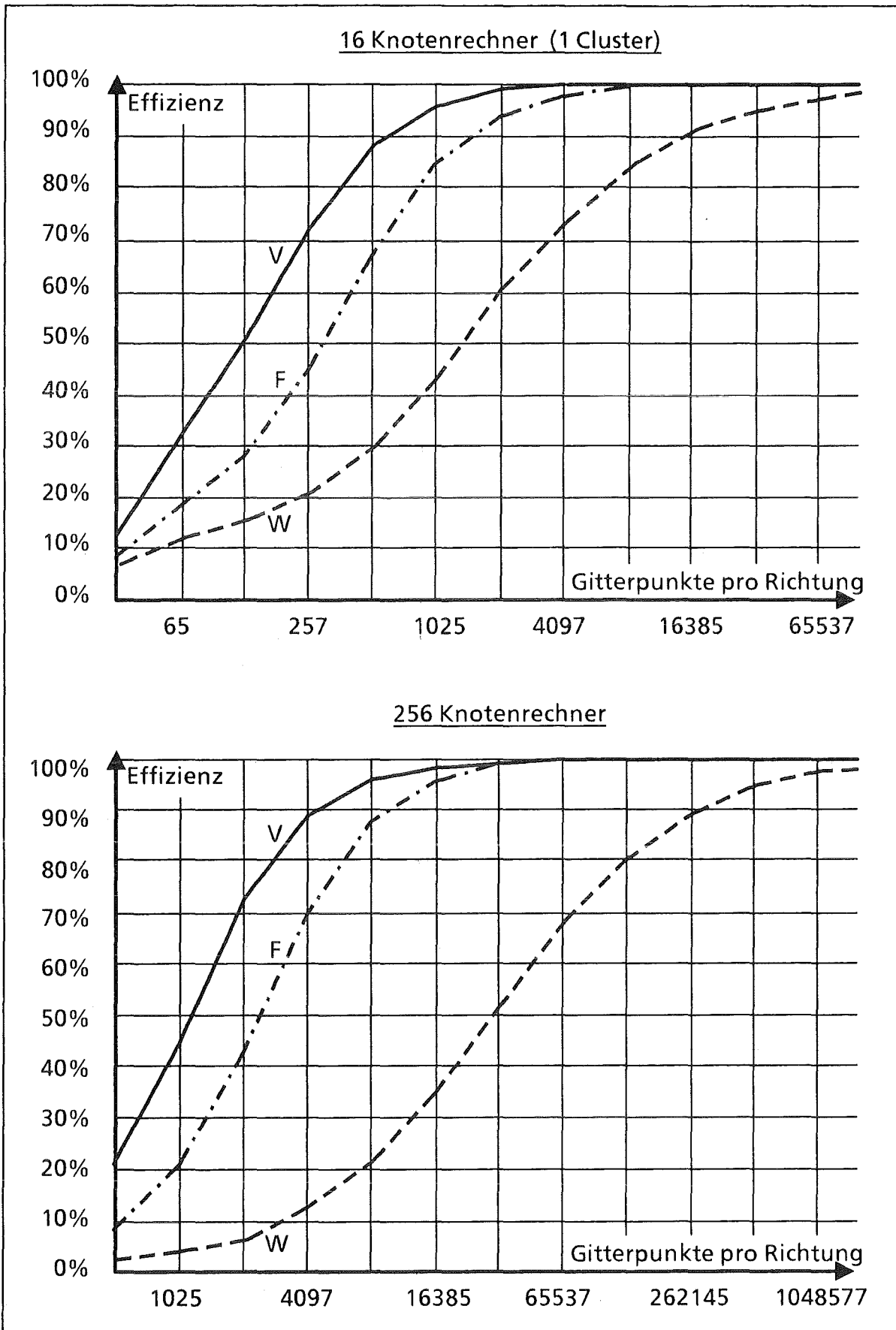


Abb. 6.1.7: Multiprozessoreffizienz in Abhängigkeit vom Mehrgitter-Zyklustyp (Abb. 6.1.6), von der Gittergröße und der Anzahl der Knotenrechner.

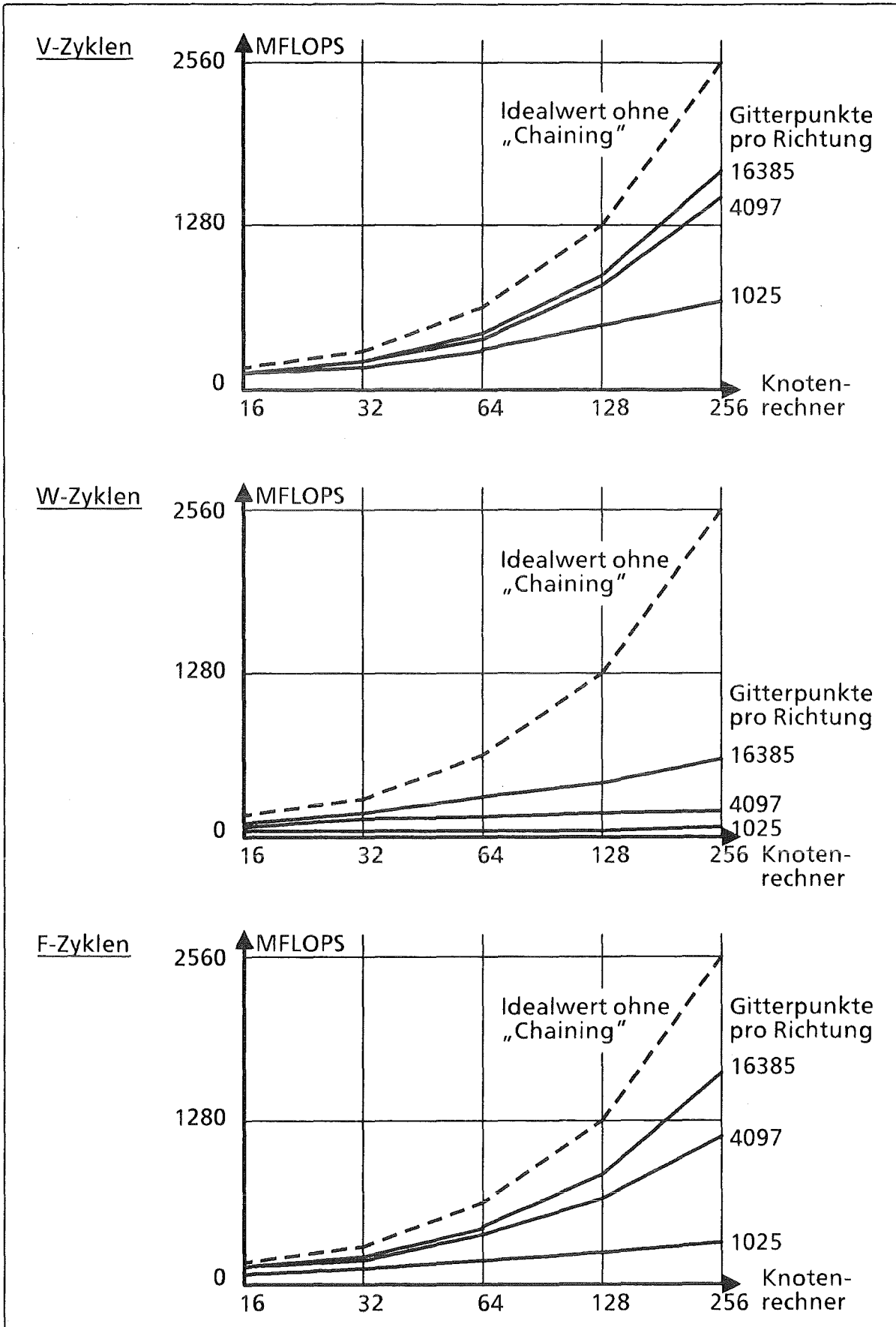


Abb. 6.1.8: Abschätzung der zu erwartenden Rechengeschwindigkeiten (MFLOPS = Millionen Gleitkommaoperationen pro Sekunde).

ken) sowie in der Art der Steuerung der parallelen Prozesse (Ablauf des die Feldberechnungen steuernden Programms entweder im initialen Prozeß oder in einem speziellen Knotenprozeß, s. Abschnitt 6.2; Umfang der von den Knotenprozessen zurückzusendenden Ergebnisse) [V14].

Zur Erzeugung der Knotenprozesse sowie für den vollständigen Nachrichtenaustausch werden ausschließlich die entsprechenden Module der SUPRENUM-Kommunikationsbibliothek [L10] aufgerufen.

Magnetostatische Felder

In der Skalarversion des Programmpakets BFCPIC wird die θ -Komponente B_θ des magnetostatischen Feldes mittels des Ampèreschen Gesetzes berechnet [L27]. Diese Berechnungen erfordern nur sehr geringe Rechenzeiten [V07], so daß eine Beschleunigung durch Parallelisierung nicht erforderlich ist.

Allerdings können die berechneten Ergebnisse vor allem in der Startphase der Iteration zu ungenau sein. Deshalb wurde untersucht, ob alternativ die Berechnung über die z- und r-Komponenten des magnetostatischen Vektorpotentials sinnvoll ist. Dazu wurden Tests mit einer entsprechend modifizierten Version des oben beschriebenen elektrostatischen Programms durchgeführt. Diese Untersuchungen ergaben jedoch, daß diese Alternative, die mit einem viel höheren Rechenaufwand verbunden ist, keine wesentlich höhere Genauigkeit liefert.

Deshalb wird das Ampèresche Gesetz zur Bestimmung von B_θ auch in der Parallelversion BFCPIC-P angewendet. Dies geschieht im Steuerprozeß (s. Abschnitt 6.2, Abb. 6.2.3 und 6.2.4) während der Berechnung der elektrostatischen Felder.

In Zukunft ist eine Erweiterung von BFCPIC(-P) von 2 auf „2,5 Dimensionen“ geplant, bei der zusätzlich auch ein azimuthaler Anteil j_θ der Stromdichte zugelassen ist. Daher sind auch die z- und die r-Komponente des Magnetfelds zu berücksichtigen. Es ist sinnvoll, diese über die θ -Komponente des Vektorpotentials A_θ zu berechnen. Dazu kann eine leicht modifizierte Variante des oben beschriebenen elektrostatischen Mehrgitterprogramms verwendet werden.

6.2 Arbeitspaket 2D-PLAS **(Teilchensimulation in 2D-Plasmen)**

Die Aufgabe von 2D-PLAS besteht darin, die Module Interpolation, Teilchenfortbewegung, Lokalisierung und Berechnung der Ladungs- und Stromdichten (siehe Kapitel 4 und Abb. 4.0) des BFCPIC Codes parallel durchzuführen. Eingabe sind die auf einem aus irregulären Viereckszellen bestehenden 2D-randangepaßten Gitter vorgegebenen elektro-magnetischen Felder und die sich im Berechnungsgebiet befindenden Simulationsteilchen (Elektronen und bis zu fünf verschiedene Ionen-sorten). Die Ausgabe besteht aus den Ladungs- und Stromdichten auf den Punkten des Gitters.

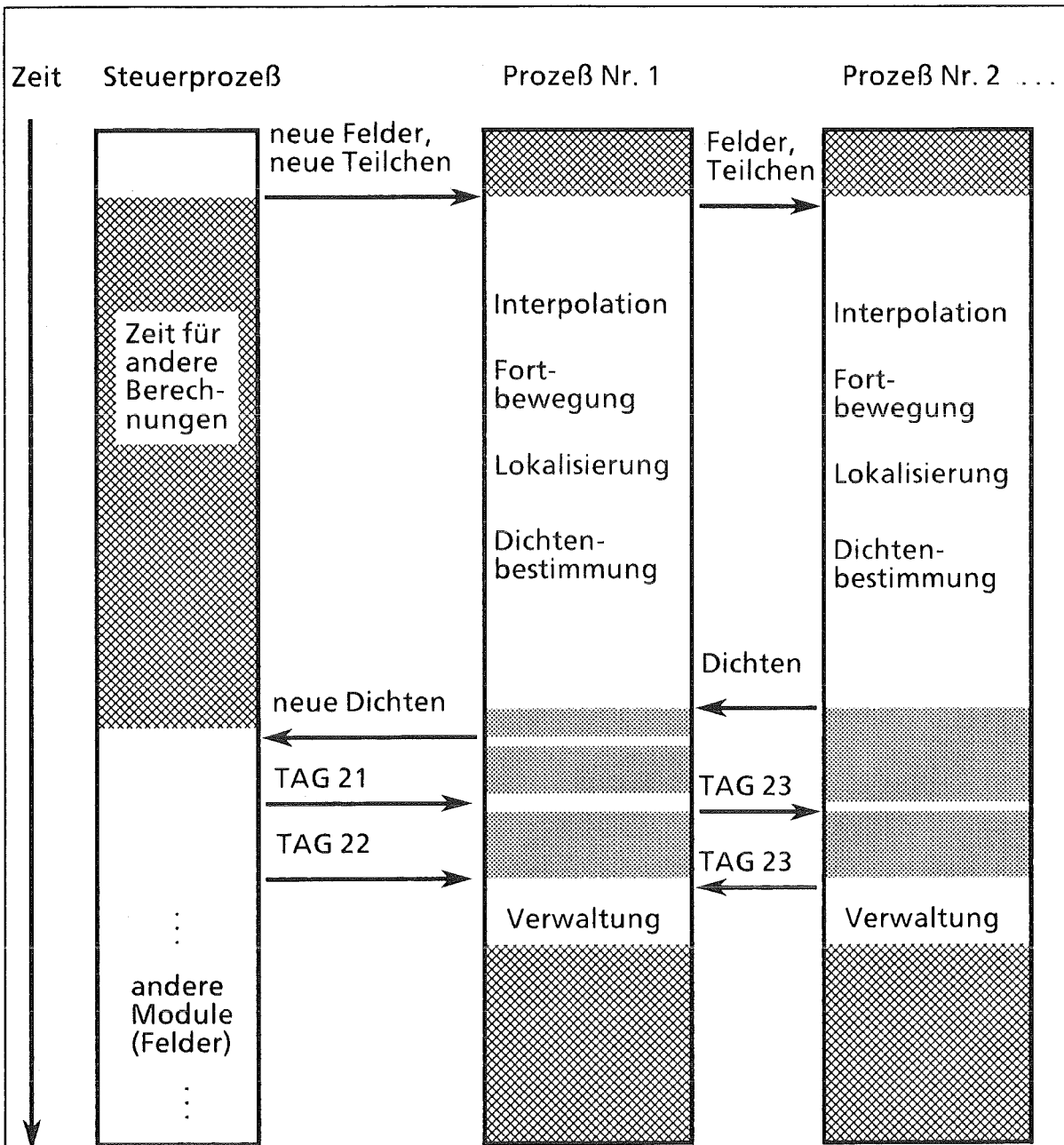
Außerdem wird in diesem Arbeitspaket die Verbindung zur Feldberechnung (s. Arbeitspaket 2D-DIO, Abschnitt 6.1) hergestellt.

Module zur Behandlung der Simulationsteilchen

Nach der Erzeugung der Teilchenprozesse werden die vorhandenen Simulationsteilchen auf die sogenannten Teilchenprozesse aufgeteilt, zusammen mit den für ihre Bearbeitung erforderlichen permanenten Daten. Dann können die Module zur Fortbewegung der Teilchen aufgerufen werden. Bei jedem Aufruf werden die außerhalb des Arbeitspakets berechneten elektrischen und magnetischen Felder den Teilchenprozessen mitgeteilt, zusammen mit evtl. neu zu bearbeitenden Teilchen, die dann in die bestehenden Teilchenmatrizen einsortiert werden.

Die neuen elektrischen und magnetischen Felder, die an den Knotenpunkten des Gitters bekannt sind, werden mittels der erweiterten Area-Weighting Methode [V01-V03] auf die Teilchenorte interpoliert. Dazu wird die irreguläre Viereckszelle auf ein Einheitsquadrat transformiert, um die übliche Area-Weighting Methode [L11;V01-V03] anwenden zu können.

Aufgrund der dadurch erhaltenen Felder an den Teilchenorten werden die Teilchen durch Anwendung eines (für Elektronen relativistischen, für Ionen nichtrelativistischen) Particle Pushers [L03,L28], dem ein sog. Leapfrog-Diskretisierungsschema [L11] zugrundeliegt, fortbewegt. Zur Integration der Lorentz-Gleichung wird ein Particle Pusher, der auf Buneman [L03] zurückgeht, eingesetzt. Wegen der höheren Elektronengeschwindigkeit wird die Elektronenfortbewegung während eines Zeitschritts in einer Subzeitskala in mehrere Teile zerlegt [L29;V15].



Legende:

- TAG 21 : Mitteilung, an anderen Prozeß Teilchen abzugeben
- TAG 22 : Mitteilung, von anderem Prozeß Teilchen zu erhalten
- TAG 23 : Senden bzw. Empfangen von Teilchen

: lange Wartephase

: kurze Wartephase

(Anm.: die Höhen der schraffierten Flächen entsprechen i. allg. nicht der Länge der Wartephasen!)

Abb. 6.2.1: Zeitlicher Ablauf der Kommunikation.

Die neue Lage der Teilchen im Gitter wird in einem schnellen Lokalisierungsalgorithmus [L31] bestimmt, bevor die Ladungen der Teilchen auf die Gitterpunkte verteilt und die Ladungs- und Stromdichten bestimmt werden.

Nachdem die Berechnungen abgeschlossen sind, werden die neuen Ladungs- und Stromdichten zurückgesandt. Falls die Teilchendaten (Phasenraumkoordinaten, Ladungen) erwünscht sind, können sie von den Teilchenprozessen angefordert werden. Nach dem Versenden ihrer Resultate und der Durchführung von Datenorganisation warten die Teilchenprozesse dann auf neue Daten (bzw. terminieren, falls keine weiteren Berechnungen durchzuführen sind), um den eben beschriebenen Zyklus zu wiederholen. Der Ablauf der Programme ist in Abbildung 6.2.1 dargestellt.

Die Verteilung der Teilchen an die Teilchenprozesse erfolgt mit dem Ziel, jeden Teilchenprozeß mit möglichst gleich vielen Teilchen zu versehen, um eine optimale Auslastung zu erreichen. Mit der Zeit kann sich jedoch aus verschiedenen Gründen ein Ungleichgewicht in der Auslastung einstellen. Daher wurde eine Routine entwickelt, die diese Auslastung überprüft und ggf. notwendige Schritte (Teilchenaustausch zwischen Teilchenprozessen) veranlaßt.

Um die Kommunikation beim Versenden der Felder zu Beginn und dem Empfangen der Dichten am Ende der Berechnungen zu beschleunigen, wird die Kom-

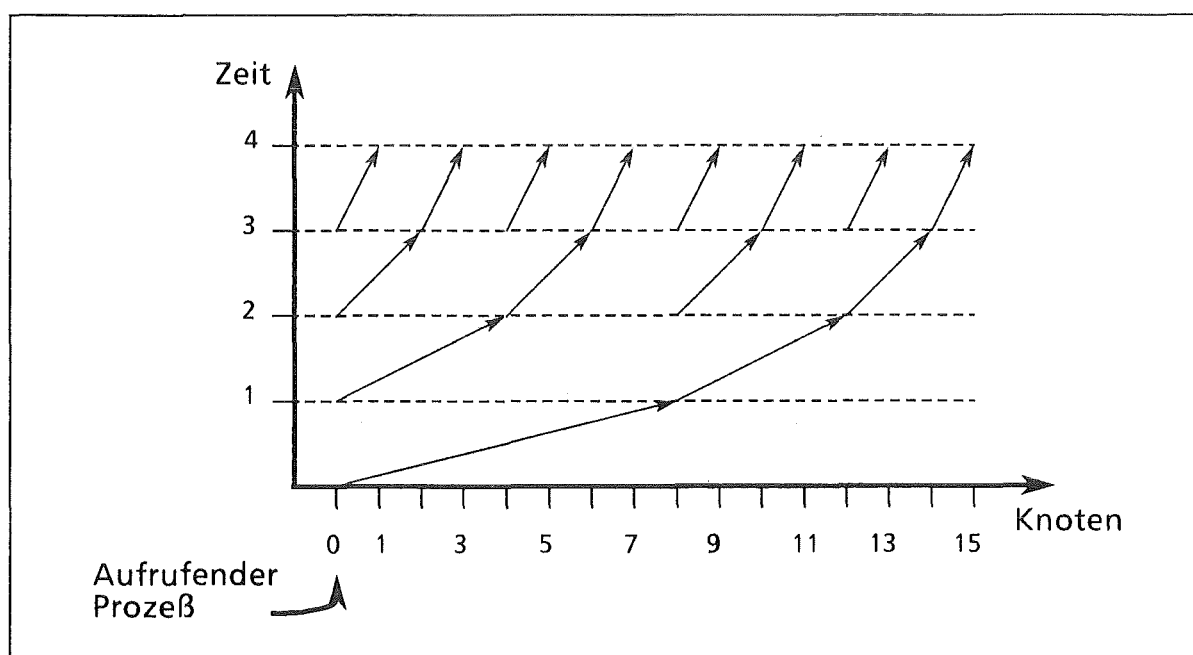


Abb. 6.2.2: Baumstruktur der Kommunikation (bei 15 Teilchenprozessen): Zunächst sendet Prozeß 0 an Prozeß 8, der im nächsten Schritt an Prozeß 12, während Prozeß 0 an Prozeß 4 sendet, usw.

munikation mittels einer Baumstruktur abgewickelt. Da ein Prozeß gleichzeitig an alle Teilchenprozesse bzw. alle Teilchenprozesse gleichzeitig an einen Prozeß senden müssen, könnte dies sonst zu einem Kommunikationsstau führen. Die Baumstruktur ist in Abb. 6.2.2 für den Fall von 15 Teilchenprozessen dargestellt, an die vom aufrufenden Prozeß (der auf Knoten 0 läuft) Felder versandt werden.

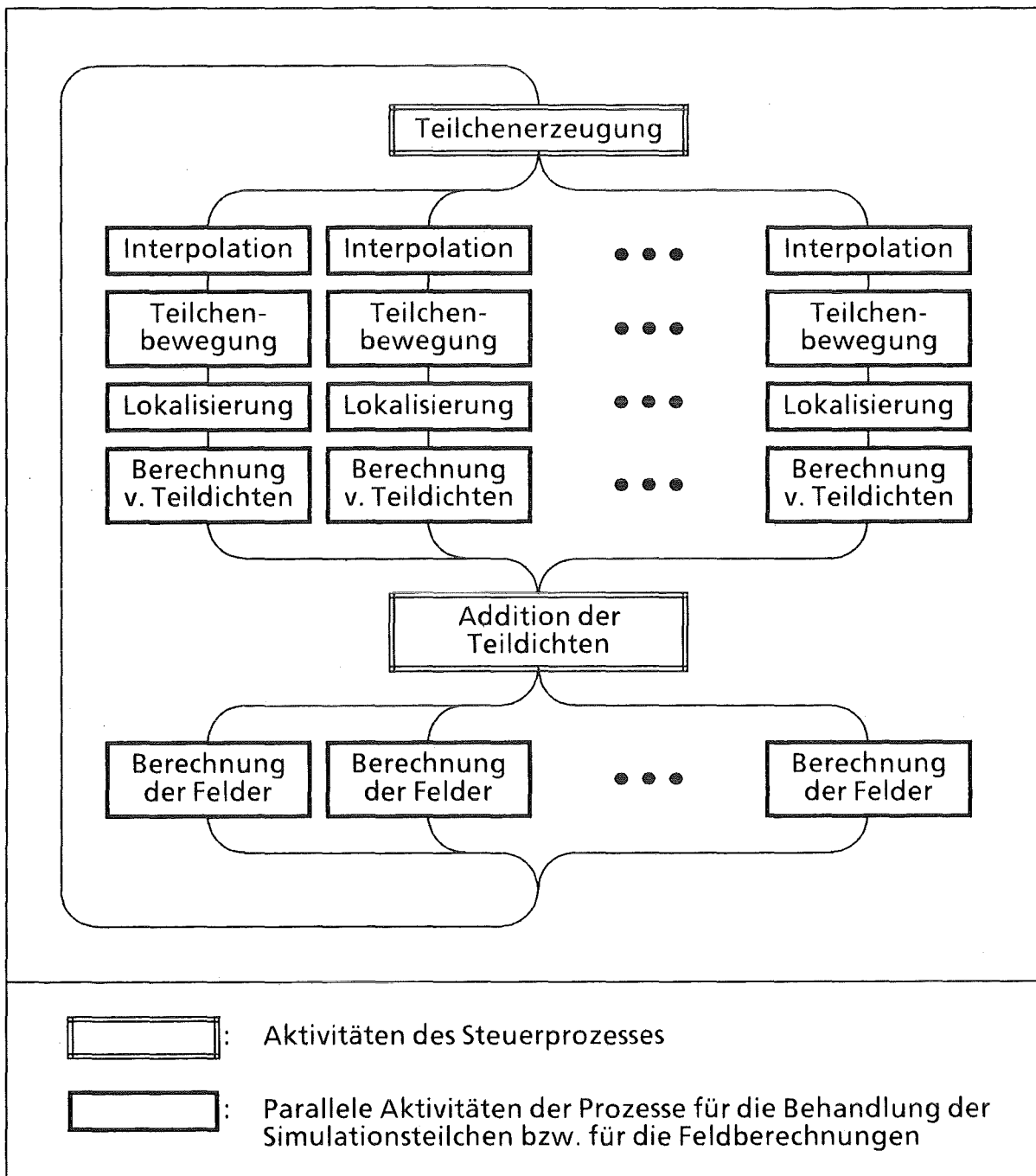


Abb. 6.2.3: Prinzip der Parallelisierung der Zeitschleife.

Gesamte Zeitschleife mit Feldberechnungen

Das Erzeugen der Teilchenprozesse muß zwar aus Speicherplatzgründen vom initialen Prozeß aus erfolgen (evtl. müssen sehr viele Anfangsdaten – je 7 Daten für bis zu $10^4 - 10^5$ Teilchen – an die Teilchenprozesse versandt werden), jedoch kann das Versenden der Felder und das Empfangen der Dichten auch von einem anderen Prozeß aus geschehen. Dazu wurde ein spezieller Steuerprozeß entwickelt [V11,V15]. Dieser Prozeß koppelt auch dieses Arbeitspaket mit dem Arbeitspaket 2D-DIO (vgl. Abschnitt 6.1) zur Berechnung der Felder (s. Abb. 6.2.3 und 6.2.4). Bei Verwendung dieses Prozesses muß der Anwender nur in der Initialisierungsphase den Steuerprozeß und die Teilchenprozesse erzeugen. Für jeden Zeitschritt müssen dann lediglich Steuerungsparameter zum Starten versandt werden. Diese Parameter geben an, welche diagnostischen Daten er-

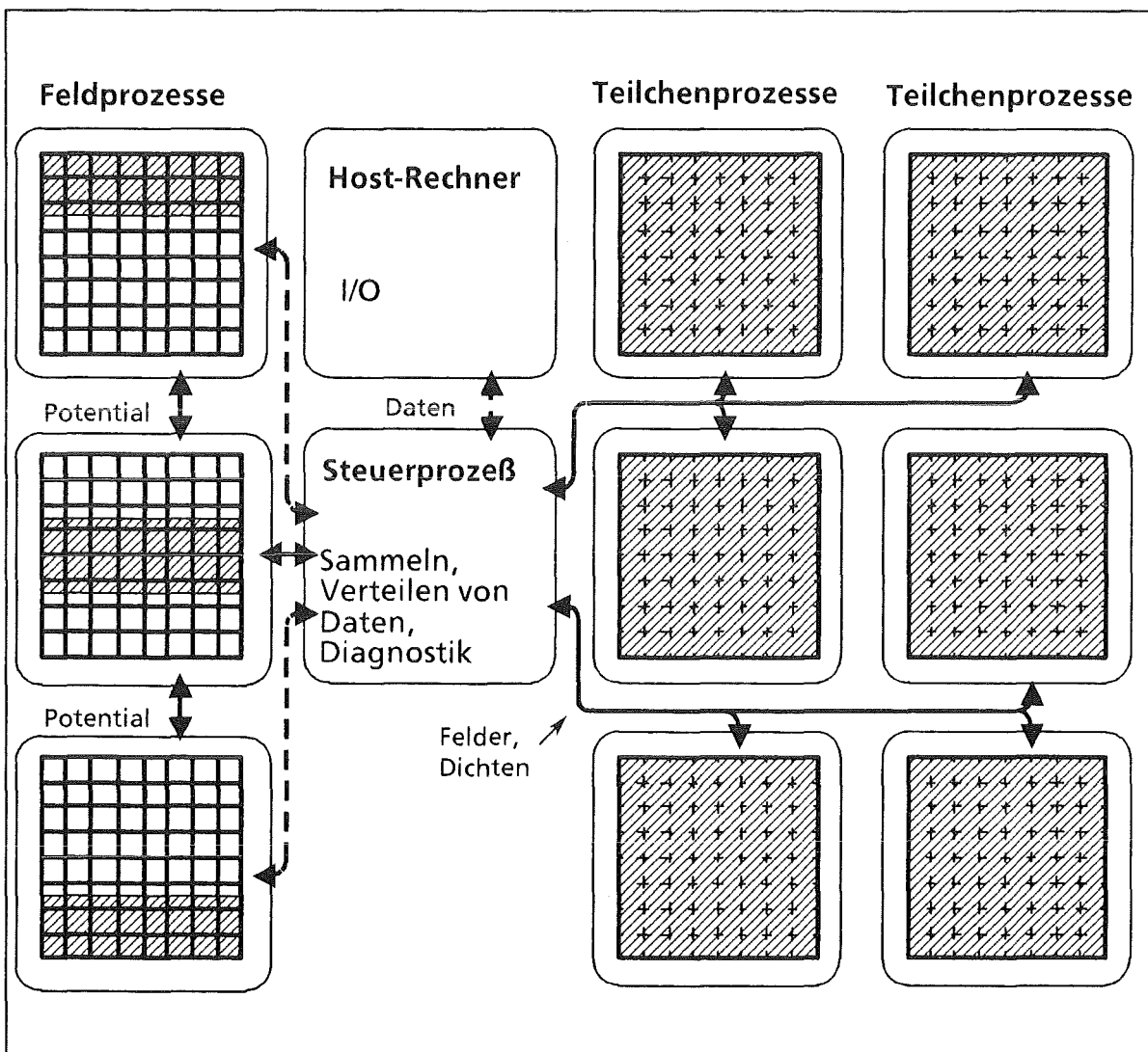


Abb. 6.2.4: Kommunikation zwischen den einzelnen Prozessen

wünscht sind. Am Ende der Berechnungen werden die gewünschten Daten (Dichten, Felder, Ladungen, weitere diagnostische Daten) empfangen wie auch - falls erwünscht - die Teilchenmatrizen. Diese Daten können nach dem Starten der nächsten Berechnungen verarbeitet werden (siehe Abb. 6.2.4). Für eine weitergehende Beschreibung des Programms wird auf [V15] verwiesen.

Da der SUPRENUM-Rechner zum Stichtag dieses Berichts (31.12.1989) noch nicht verfügbar war, können keine endgültigen Rechenzeiten präsentiert werden. Im September 1989 wurde jedoch eine Testversion des Arbeitspakets auf dem zur Verfügung stehenden SUPRENUM-Prototyp (ein Cluster) implementiert, um die Funktionalität des Programms zu überprüfen. Die bei diesen Testläufen gemessenen Rechenzeiten sind jedoch nur relativ zu interpretieren, da am Prototyp

- die Vektorverarbeitung nicht einsatzfähig war,
- bei der Kommunikation jedes zu versendende Wort einzeln in den Buffer geschrieben wurde,

und bei der verwendeten Testversion des Programms

- Kommunikation in mehrere (bis zu fünf) Teile aufgespalten war,
- Bestätigungen (Synchronisierung) eingebaut waren,
- nur ein kleines Testbeispiel verwendet wurde (etwa 2 000 Teilchen statt der typischen 50 000).

Abb. 6.2.5 zeigt den erreichten Speed-up, der bei der Durchführung der Behandlung der Simulationsteilchen auf 2, 4, 8 und 14 parallelen Teilchenprozessen in 1 000 Zeitschritten gemessen wurde.

Bei dieser geringen Teilchenzahl waren die Knotenrechner jedoch noch nicht ausgelastet. Deshalb wurden die Ergebnisse auf eine Anzahl von insgesamt 20 000 Teilchen hochgerechnet, s. die gestrichelten Kurven in Abb. 6.2.5. Der bei 14 Prozessen zu erwartende Speed-up liegt dann bei ca. 12.

Bei diesen Testläufen war es noch nicht möglich, sowohl die Feldberechnungen (s. Arbeitspaket 2D-DIO, Abschnitt 6.1) als auch die Teilchenbehandlung parallel auszuführen. Zur Berechnung der Felder wurde daher eine skalare Programmversion verwendet.

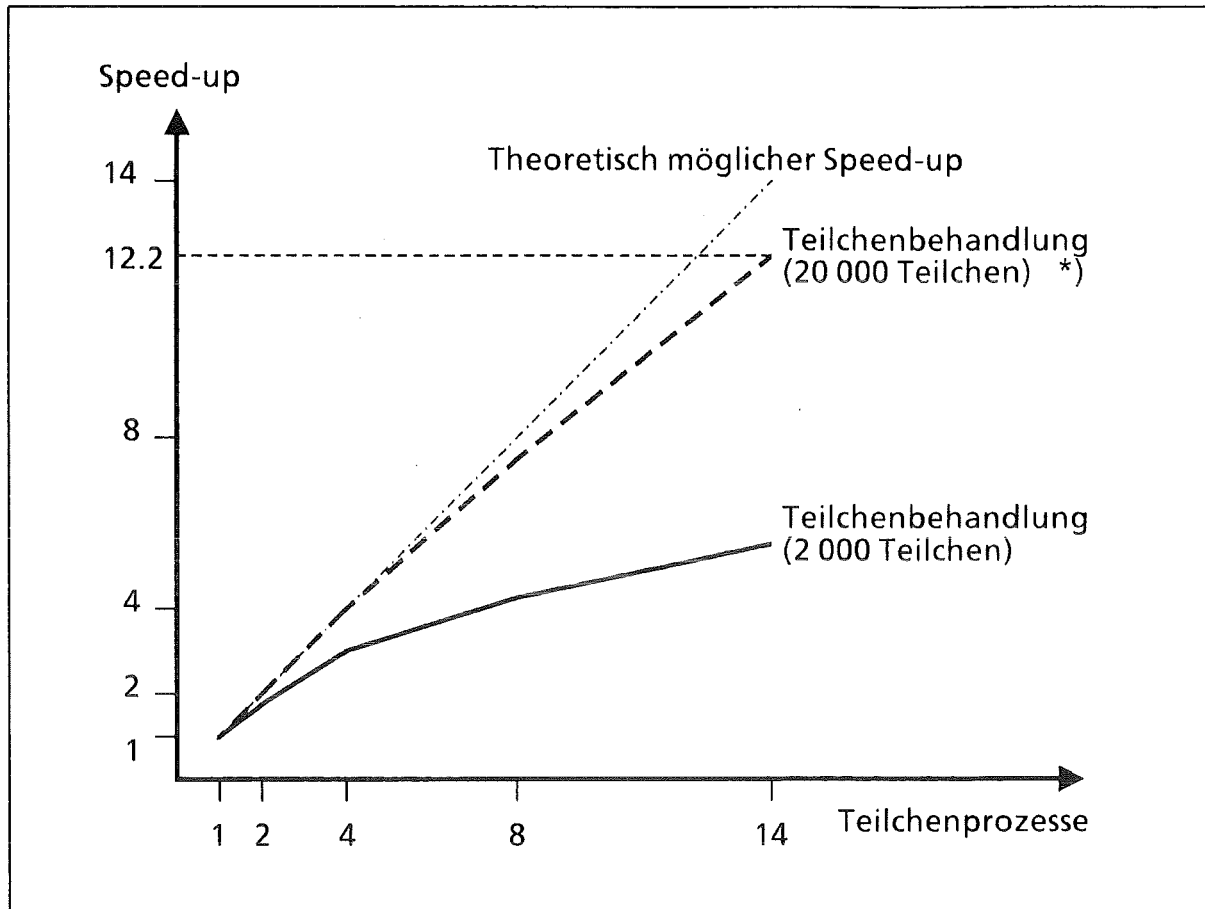


Abb. 6.2.5: Speed-up für die Behandlung der Simulationsteilchen auf 2, 4, 8 und 14 Knotenrechnern. *) Hochgerechnete Werte, s. Text

7. Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse

Der Nutzen speziell der SUPRENUM-Version BFCPIC-P für das KfK besteht darin, daß den experimentell arbeitenden Physikern die Entwicklung und Optimierung von Hochstrom-Ionendioden wesentlich erleichtert werden kann, wie dies bereits mit Hilfe der Skalar- und Vektorversion des BFCPIC-Codes bei einer B_0 -Diode demonstriert wurde [L30]. Damit werden der Zeitaufwand und die Kosten erheblich verringert. Außerdem wird damit gerechnet, neue wissenschaftliche Erkenntnisse in physikalischer Hinsicht zu gewinnen und zu einem tieferen Verständnis der in den Dioden ablaufenden Vorgänge zu gelangen. Dies hat wiederum Rückwirkungen auf die Konstruktion der Geräte.

Die von uns entwickelten parallelen Algorithmen lassen sich prinzipiell auch auf andere Vielteilchen-Simulationsmodelle übertragen.

Die bei diesen Arbeiten gesammelten Erfahrungen bei der Vektorisierung und Parallelisierung größerer Programmpakete lassen sich auch bei späteren (Weiter-)Entwicklungen verwerten.

Beide Arbeitspakete stehen beispielhaft für größere Klassen von Anwendungen:

Das Arbeitspaket 2D-DIO beinhaltet die Lösung einer partiellen Differentialgleichung auf einem vorgegebenen zweidimensionalen randangepaßten Gitter. Zur Implementierung dieses Pakets auf SUPRENUM war die Entwicklung eines speziellen Parallelisierungskonzepts notwendig.

- Die Diskretisierungen in einem randangepaßten Gitter führen zu Operatoren, die auf alle 8 Nachbarn zugreifen. Zur Fehlerglättung wird deshalb ein „Vier-Farb“-Relaxationsschema angewendet. Dieses wurde gegenüber den bisher gebräuchlichen (s. z.B. [L21]) so modifiziert, daß sich die erforderliche Kommunikation mit Nachbarprozessen auf nur noch eine Nachricht pro Relaxationsschritt und Nachbarprozeß beschränkt. Weitere Untersuchungen [L17,V10] haben inzwischen gezeigt, daß sich dieses Konzept auch auf andere Gitteralgorithmen übertragen läßt.
- Wenn das randangepaßte Berechnungsgitter sehr stark verzerrte Gittermaschen enthält, ist unter Umständen die Durchführung von F- oder sogar W-Zyklen anstelle der gewöhnlichen V-Zyklen erforderlich [V04]. Dies ist mit

einem größeren Anteil der groben Gitter am Rechenaufwand verbunden. Um auch diese Zyklustypen effizient behandeln zu können, wurde ein Agglomerationsschema entwickelt, welches durch eine geeignete Zusammenfassung der Berechnungen von jeweils zwei oder mehr benachbarten Prozessen in nur noch einem Prozeß den Kommunikationsaufwand speziell auf den größten Gittern verkleinert oder sogar ganz vermeidet, s. Abb. 6.1.4 und 6.1.5. Auch dieses Prinzip ist auf andere Probleme übertragbar.

Im Arbeitspaket 2D-PLAS werden die Bewegungsbahnen elektrisch geladener Teilchen in vorgegebenen elektromagnetischen Feldern berechnet. Die im Rahmen des Projekts entstandenen hauptsächlichsten Entwicklungen lassen sich in zwei Teile gliedern, in den Teil der numerischen Verfahren und in den Teil der Parallelisierung:

- Die numerischen Verfahren wurden verbessert, speziell die Module Interpolation und Lokalisierung (siehe Abschnitt 6.2 bzw. [V01-V03]). Diese Verfahren sind auch auf ähnlich gelagerte Probleme in randangepaßten Gittern übertragbar.
- Es wurden zwei unterschiedliche Parallelisierungsstrategien untersucht [V09]; eine durch Gebietsaufteilung (jedem Prozeß wird ein Streifen des Berechnungsgebiets mit den darin befindlichen Simulationsteilchen zugewiesen) und eine durch eine portionsweise Aufteilung der Simulationsteilchen, wobei letztere in das Arbeitspaket übernommen wurde. Für zukünftige Probleme, bei denen eine Gebietsaufteilung erforderlich ist, kann auf die erste Strategie zurückgegriffen werden. Die im Rahmen des Projekts entwickelten Programme zur Abwicklung der Kommunikation lassen sich grundsätzlich auf andere Vielteilchensysteme übertragen.

Für Teile der Skalar- bzw. Vektorversion von BFCPIC wurden inzwischen Software-Benutzungsvereinbarungen mit externen Institutionen, die an mit den unseren verwandten Themen arbeiten, abgeschlossen bzw. vorgesehen. Wenn nach Durchführung von repräsentativen Testläufen auf SUPRENUM ein entsprechender Nutzen erkennbar ist, kann auch ein Interesse an der Parallelversion erwartet werden.

Daneben ermöglichen die Programme die Durchführung von weiteren Testläufen zur Aufdeckung etwaiger Fehler und Schwachstellen in Hard- und Betriebssoftware sowie zur konzeptionellen Weiterentwicklung des SUPRENUM-Rechners.

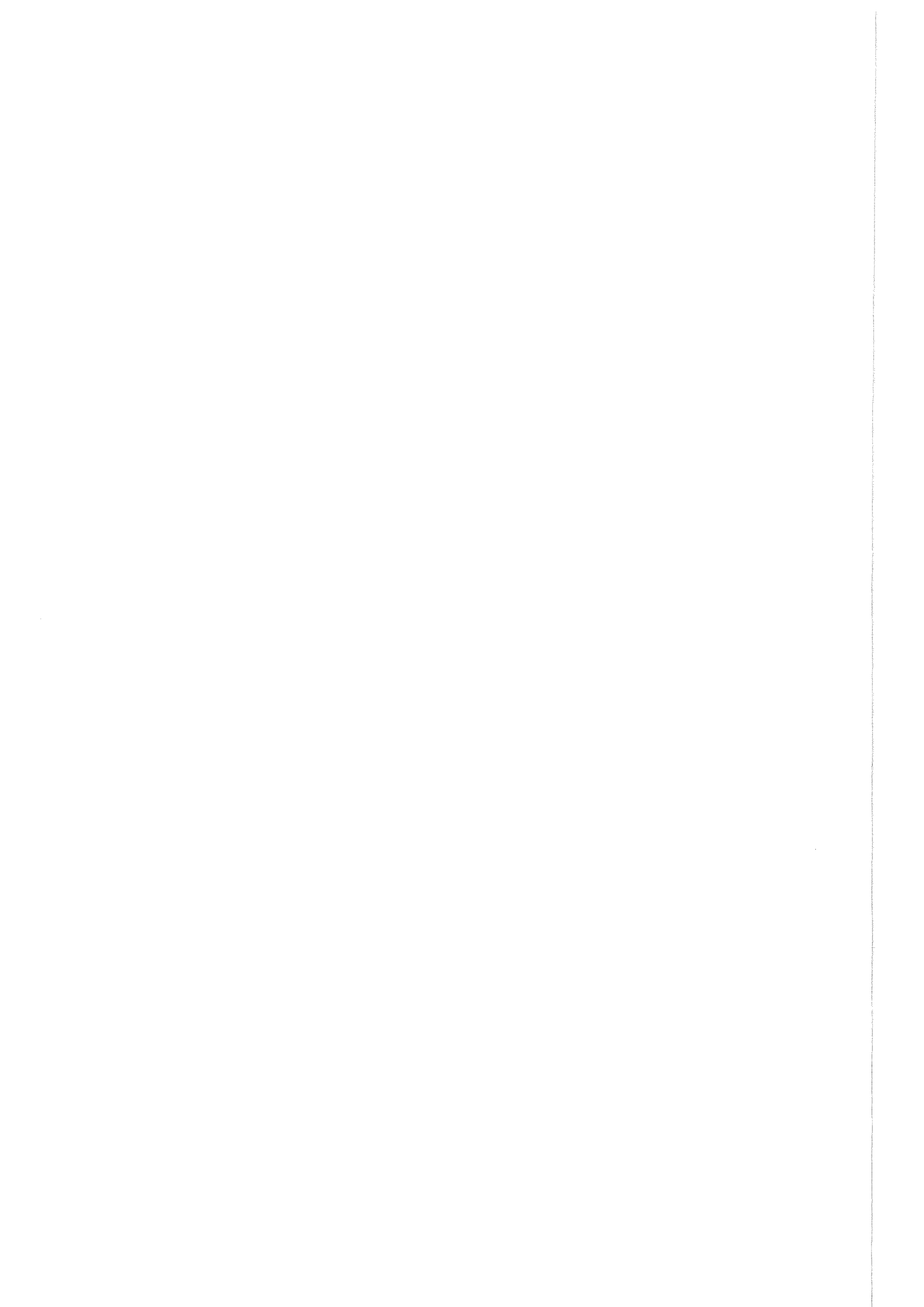
8. Während der Durchführung des Vorhabens bekanntgewordener Fortschritt bei anderen Stellen

Auch in anderen Institutionen, speziell in den USA und Japan, wurden im Berichtszeitraum Arbeiten über Parallelisierung von Particle-in-Cell Codes durchgeführt. Da es uns aufgrund der Nicht-Verfügbarkeit von SUPRENUM noch nicht möglich war, Testläufe mit genauen Zeitmessungen durchzuführen, sind die Arbeiten bei den anderen Institutionen eher veröffentlichungsreif geworden. Uns sind im wesentlichen vier Arbeiten zu dieser Thematik bekannt. Es handelt sich um Parallelisierungen von zweidimensionalen elektrostatischen Particle-in-Cell Codes

- auf einem iPSC Hypercube (Lubeck, Faber [L16])
- auf einem PAX computer (Hoshino et. al. [L12])
- auf einem Ncube (Huff, Dawson [L13])
- auf einem JPL Mark III Hypercube (Liewer, Decyk [L15]).

Die Unterschiede zu den im KfK durchgeführten Arbeiten liegen zum einen darin, daß andere Codes, bei denen die Aufgabenstellungen unterschiedlich sind, parallelisiert wurden (speziell wurden keine randangepaßten Koordinaten verwendet) und in den Parallelisierungsstrategien. Nur in [L16] wird für die Behandlung der Simulationsteilchen eine ähnliche Strategie eingesetzt wie in BFCPIC-P, bei den anderen handelt es sich um eine zweidimensionale Gebietsaufteilung, in [L12] werden jedem Prozeß mehrere Rechtecke zur Bearbeitung zugeteilt, in [L13] und [L15] werden Teilgebiete unterschiedlicher Größe behandelt, um eine gleichmäßige Auslastung der Prozesse zu erreichen. Diese Arbeiten sind für unsere Aufgaben nicht unmittelbar anwendbar, da einerseits die numerischen Methoden und andererseits die verwendeten Rechner (und damit speziell Sprachkonstrukte) unterschiedlich sind.

Bei der Parallelisierung von Mehrgittermethoden wurden von anderer Seite ebenfalls Fortschritte erzielt. Die von uns zur Minimierung des Kommunikationsaufwands entwickelte Variante der „Vier-Farb“-Relaxation, in Verbindung mit einem passenden Agglomerationskonzept, ist in der Literatur bisher jedoch nur ansatzweise untersucht worden (s. [L17]).



9. Erfolgte und geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse *)

Zugrundeliegende Numerik

- [V01] D. Seldner, T. Westermann:
Numerische Algorithmen für zweidimensionale Teilchen-
Simulationsmodelle in technisch relevanten Geometrien.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4282, Juni 1987
- [V02] D. Seldner, T. Westermann:
Methods for Interpolation and Localization in Irregular 2D Meshes.
XIII th IMACS World Congress on Scientific Computing, Paris,
18.-22.7.1988, Band III, S. 247-249
- [V03] D. Seldner, T. Westermann:
Algorithms for Interpolation and Localization in Irregular 2D Meshes.
J. Comp. Phys. Vol. 79 No. 1, Nov. 1988, S. 1-11
- [V04] M. Alef:
Effiziente Berechnung elektrostatischer Potentiale mit
Mehrgittermethoden in technischen Geometrien.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4613, Oktober 1989

Parallelisierung für SUPRENUM

- [V05] M. Alef, D. Seldner, T. Westermann:
Numerische Algorithmen für elektrodynamische Modelle und ihre
Implementierung auf Supercomputern.
Informatik-Fachberichte 150 (J. Halin, Hrsg.), Springer-Verlag 1987,
S. 298-305
- [V06] D. Seldner, M. Alef, T. Westermann, E. Halter:
Parallel Particle Simulation in High Voltage Diodes
In [L26], S. 445-449
- [V07] M. Alef, D. Grether, D. Seldner, T. Westermann:
Diodensimulation mit der „Particle-in-Cell“-Methode und mögliche
Implementierung auf SUPRENUM.
KfK-Nachrichten Jahrgang 20 (1988), S. 179-187
- [V08] M. Alef, E. Gabowitsch, D. Grether, E. Halter, S. Kawata,
M. Sararu, D. Seldner, T. Westermann:
Particle-in-Cell Simulation of KfK High Voltage Diodes.
Proc. 7th international Conference on High-Power Particle Beams,
Karlsruhe, 4.-8.7.1988 (W. Bauer, W. Schmidt, Hrsg.),
Band I, LP14, S. 563-568
- [V09] D. Seldner:
Modelle zur Parallelisierung der Teilchenbehandlung in Particle-in-Cell
Codes auf MIMD-Rechnern mit lokalem Speicher am Beispiel SUPRENUM.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4495, Januar 1989

*) Die Liste der verwendeten Fachliteratur ([Lxx]) findet sich in Abschnitt 4.2.

- [V10] M. Alef:
Concepts for Efficient Implementation of Multigrid Methods
on SUPRENUM-Like Architectures.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4614, Oktober 1989
- [V11] M. Alef, D. Seldner, T. Westermann:
Teilchensimulation in der Plasmaphysik.
KfK-SUPRENUM-Seminar, KfK Karlsruhe, 19.-20.10.1989.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4714 (H. Trauboth, Hrsg.), 1990
- [V12] T. Westermann, M. Alef, D. Seldner:
Implementation of the BFCPIC Code on Vector and Massively Parallel
Computers.
Proc. 13th Conference on the Numerical Simulation of Plasmas,
Santa Fé, New Mexico, 17.-20.9.1989, PMB6
- [V13] M. Alef:
Lösung der Poisson-Gleichung in randangepaßten Gittern mit
Mehrgittermethoden und Parallelisierung am Beispiel SUPRENUM.
ASIM-Arbeitskreis 4.5.1.2 „Partielle Differentialgleichungen:
Algorithmen, Software und Anwendungen“, ETH Zürich, 8.-9.3.1990
(in Vorbereitung)

Programmdokumentationen der SUPRENUM-Versionen

- [V14] M. Alef:
Parallele Berechnung elektrostatischer Potentiale und Felder in
technischen Geometrien auf SUPRENUM
– Benutzerhandbuch EPOTZR-P und EFLDZR-P –.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4688, Februar 1990
- [V15] D. Seldner:
Parallel Treatment of Simulation Particles in Particle-in-Cell Codes on
SUPRENUM.
Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4692, 1990

Danksagung

An dieser Stelle möchten wir uns beim Leiter des Instituts für Datenverarbeitung in der Technik (IDT) des KfK, Herrn Prof. Dr. H. Trauboth, für die Unterstützung unserer Arbeiten bedanken.

Unser besonderer Dank gilt auch Herrn Prof. Dr. E. Halter für die im Vorfeld des Projekts geleisteten Arbeiten, für die Einarbeitung in die Thematik sowie für zahllose Diskussionen über die Weiterentwicklung und Parallelisierung der Programme.

Dank gebührt vor allem auch dem Verfasser des BFCPIC-Codes, Herrn Thomas Westermann, für die Mithilfe bei der Vektorisierung der Programme, für fachliche Anregungen und Verbesserungsvorschläge sowie die gute Zusammenarbeit. Dem Leiter der Abteilung Numerische Physik (HDI 3), Herrn Prof. Dr. W. Schmidt, danken wir für die fachliche Betreuung in der Endphase des Vorhabens.

Weiter danken wir den Mitarbeitern im SUPRENUM-Projekt für ihre freundliche Unterstützung, sei es durch Diskussionen oder durch die Hilfe bei der Implementierung und den Tests der Programme auf dem SUPRENUM-Prototyp.

Schließlich möchten wir dem Bundesminister für Forschung und Technologie (BMFT) für die finanzielle Förderung des Vorhabens danken, ohne die die Arbeiten nicht möglich gewesen wären.