

Реализация эффективных параллельных вычислений при моделировании больших задач физики плазмы методом частиц в ячейках*

Е.А. Берендеев¹, А.А. Ефимова²

Новосибирский государственный университет¹,
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН²

Рассмотрены основные варианты параллельной реализации метода частиц в ячейках для решения больших задач физики плазмы. Проведено сравнение эффективности распараллеливания на примере задачи об аномальной теплопроводности. Задача рассматривается в двумерной постановке. В работе предложен эффективный алгоритм распараллеливания, позволяющий достигнуть высокой масштабируемости вычислений.

1. Введение

Актуальность работы связана с необходимостью повышения эффективности использования суперЭВМ для решения ресурсоёмких задач физики плазмы. Для этого необходимо выполнить эффективную параллельную реализацию используемых алгоритмов. При этом для достижения масштабируемости вычислений на большое число процессоров необходимо учитывать особенности самого алгоритма. Многие простые и хорошо масштабируемые на нескольких десятках процессоров параллельные реализации могут оказаться неэффективными, если исходный последовательный алгоритм использует такие особенности архитектуры компьютера, как кэширование, SSE-инструкции, доступ к данным. В этом случае необходимо либо модифицировать исходный алгоритм, либо внести изменения в параллельную реализацию программы.

В работе рассмотрены различные варианты распараллеливания алгоритма для следующей физической задачи. В результате релаксации в плазме мощного электронного пучка в многопробочной магнитной ловушке ГОЛ-3 (ИЯФ СО РАН) наблюдается понижение электронной теплопроводности на 2-3 порядка по сравнению с классическим значением [1]. На данный момент точное теоретическое описание этого явления отсутствует, поэтому возникает необходимость в численном моделировании. Моделирование проводится на основе метода частиц в ячейках, как наиболее подходящего для решения неравновесных задач физики плазмы.

Необходимость применения суперкомпьютерных вычислений обусловлена тем, что требуется, во-первых, достаточно подробная сетка для воспроизведения резонансного взаимодействия релятивистского электронного пучка с плазмой, и, во-вторых, большое количество модельных частиц, чтобы промоделировать возникающую в дальнейшем неустойчивость.

2. Описание модели

Рассматриваемый физический процесс описывается кинетическим уравнением Власова для ионов и электронов

$$\frac{\partial f_{i,e}}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f_{i,e}}{\partial \vec{r}} + \vec{F}_{i,e} \frac{\partial f_{i,e}}{\partial \vec{p}} = 0, \quad \vec{F}_{i,e} = q_{i,e} \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{B}] \right),$$

* Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 11-01-00249-а

и системой уравнений Максвелла

$$\operatorname{rot} \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t},$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t},$$

$$\operatorname{div} \vec{E} = 4\pi\rho,$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0.$$

Все уравнения приведены в общепринятых обозначениях. Далее все уравнения будут приводиться в безразмерном виде. Для обезразмеривания используются следующие базовые величины:

- Характерная плотность плазмы $n_0 = 10^{14} \text{ см}^{-3}$;
- Характерная скорость – скорость света $v_0 = c = 3 \times 10^{10} \text{ см/с}$;
- Характерное время $t_0 = \frac{1}{\omega_{pe}} = \sqrt{\frac{m_e}{4\pi n_e e^2}} = 1.79 \times 10^{-12} \text{ с}$. – величина, обратная к электронной плазменной частоте

Модель построена на основе метода частиц в ячейках. Характеристики уравнения Власова описывают движение модельных частиц. Уравнения этих характеристик имеют вид

$$\text{для электронов} \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -(\vec{E} + [\vec{v}, \vec{B}]),$$

$$\text{для ионов} \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = \kappa(\vec{E} + [\vec{v}, \vec{B}]),$$

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}.$$

$$\kappa = \frac{m_e}{m_i} \text{ – отношение масс электрона и иона; } \vec{p} = \gamma \vec{v}; \gamma = (1 - v^2)^{-1/2}$$

Для решения уравнений движения используется схема с перешагиванием.

$$\text{для электронов} \quad \frac{p_i^{m+1/2} - p_i^{m-1/2}}{\tau} = -(E_i^m + [\frac{v_i^{m+1/2} + v_i^{m-1/2}}{2}, B_i^m]),$$

$$\text{для ионов} \quad \frac{p_i^{m+1/2} - p_i^{m-1/2}}{\tau} = \kappa(E_i^m + [\frac{v_i^{m+1/2} + v_i^{m-1/2}}{2}, B_i^m]),$$

$$\frac{r_i^{m+1} - r_i^m}{\tau} = v_i^{m+1/2}.$$

Здесь τ – шаг по времени; верхний индекс указывает на момент времени, в который вычисляется искомая функция; нижний индекс указывает на номер частицы, для которой производится вычисление.

Для нахождения электрических и магнитных полей используется схема, в которой поля определяются из разностных аналогов законов Фарадея и Ампера [2]. Эта схема имеет второй порядок аппроксимации по пространству и по времени. Плотности заряда и тока в узлах вычисляются при помощи точного учёта потоков плазмы через границы ячеек [3]: в этом случае разностный аналог закона Ампера выполняется автоматически. Каждая частица вносит вклад в плотность тока в ближайших к ней узлах сетки, затем проводится суммирование вкладов по

всем частицам.

3. Постановка задачи

Задача рассматривается в двумерной постановке. В области, имеющей форму прямоугольника ($0 < x < L_x, 0 < y < L_y$), находится плазма, состоящая из ионов и электронов. Дополнительно в области присутствуют электроны пучка (предполагается, что пучок уже вошёл в расчётную область). Условия на границах области берутся периодическими.

В начальный момент частицы распределены по области равномерно, задаётся плотность плазмы и температура электронов и ионов. Модельные частицы пучка отличаются от модельных электронов плазмы тем, что имеют меньшую массу (отношение их масс равно отношению плотности плазмы и плотности пучка), а также движутся в одном направлении (направление X) с одинаковой скоростью (определяется кинетической энергией направленного движения). Таким образом, исходными параметрами задачи являются: плотность и температура электронов плазмы, отношение плотности электронов плазмы к плотности электронов пучка.

- Плотность электронов плазмы $n_0 = 10^{14} \text{ см}^{-3}$;
- Температура электронов плазмы $T_0 = 500 \text{ эВ}$.
- Отношение плотности электронов пучка к плотности электронов плазмы $\alpha = 2 \times 10^{-3}$
- Скорость электронов пучка $\varepsilon = 1 \text{ МэВ}$

4. Параллельная реализация

Возможно несколько вариантов параллельной реализации метода частиц в ячейках. Поскольку траектории модельных частиц вычисляются независимо друг от друга, проще всего распределить все частицы поровну между процессорами, независимо от их координаты. В этом случае каждый процессор будет решать систему уравнений Максвелла во всей области. Поскольку время расчёта значений электромагнитных полей существенно меньше времени расчёта траекторий частиц (в каждой ячейке сетки находится до 1000 частиц каждого сорта), такой вариант распараллеливания кажется очень удачным: даже для сетки 1000×1000 необходимо обмениваться на каждом шаге только 3×10^6 значениями плотности тока, что составляет около 20 Мб. Эффективность такого распараллеливания достаточна высока.

Второй вариант: провести декомпозицию расчётной области по одному направлению (например, перпендикулярному направлению движения пучка). При этом с каждой подобластью можно связать группу процессоров и разделить частицы в подобласти между всеми процессорами группы. Каждая группа решает уравнения Максвелла только в своей подобласти. В этом случае происходит обмен граничными значениями полей между группами, также группы должны обмениваться частицами, перелетевшими в соответствующую подобласть. Внутри группы происходит обмен значениями плотности тока (как и в первом варианте распараллеливания). Такой вариант распараллеливания применяется, например, при решении трёхмерных задач (в трёхмерном случае первый вариант оказывается неэффективным, поскольку пересылать приходится, например, для сетки $1000 \times 1000 \times 1000$ уже 20000 Мб). При этом существуют некоторые ограничения, связанные с числом групп: во-первых, оно не превосходит числа узлов по направлению, в котором ведётся декомпозиция, во-вторых, при большом числе групп число частиц в каждой подобласти может существенно различаться, делая нагрузку на процессоры неравномерной.

5. Вычислительный эксперимент

Все расчёты проводились на суперкомпьютере Новосибирского государственного университета. Использовались узлы HP BL2x220 G6, каждый из которых содержит: два 4-ядерных процессора Intel Xeon E5540 с тактовой частотой 2530 МГц (L2 cache 1Мб, L3 cache 8 МБ) и 16041 МБ ОЗУ. В расчётах задействовано до 128 процессорных ядер одновременно.

Для определения оптимального распределения процессоров по области, нами был проведён

ряд вычислительных экспериментов. Оказалось, что разбиение области на подобласти по 128×128 и менее ячеек (т.е. всего в подобласти 16384 ячейки) даёт ускорение почти в два раза по сравнению с первым вариантом параллельной реализации. Это связано с тем, что в кэш процессора может быть загружена вся сетка, и значения электромагнитных полей на каждом временном шаге для частиц в одной ячейке считывается из ОЗУ только один раз.

Сравнение параллельных реализаций проводилось при следующих параметрах:

По направлению Y выбиралась сетка в 1024 узла, в каждой ячейке 1000 частиц каждого сорта. Всего использовалось 128 процессоров. На рис.1, рис.2 приведено среднее время расчёта (в сек.) движения частиц (рис.1) за одну итерацию и среднее время расчёта одной итерации (рис.2) в зависимости от числа подобластей (1 соответствует первому варианту, 2 – подобласть делится на две группы процессоров по 64 процессора в каждой и т.д.) для различных вариантов сетки по направлению X (32,64,128,256)

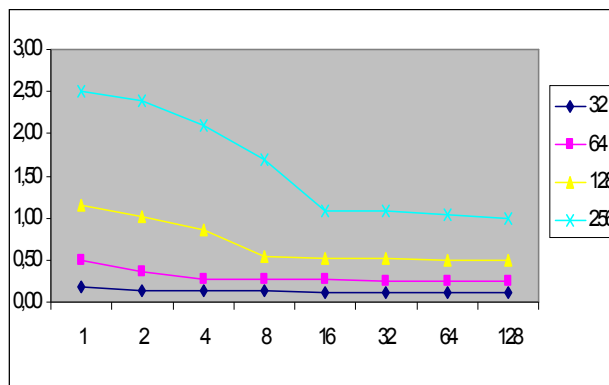


Рис. 1. Среднее время расчёта (в сек.) движения частиц за одну итерацию для различных вариантов разбиения области.

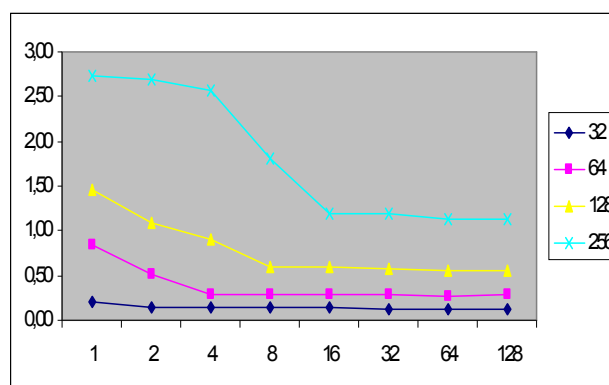


Рис. 2. Среднее время расчёта (в сек.) одной итерации для различных вариантов разбиения области.

Из рис.1 и рис.2 видно, что оптимальным является разбиение области на подобласти по 16384 ячейки, что позволяет в 2 раза ускорить вычисления.

При этом число процессоров в каждой подобласти можно увеличивать до 128, не уменьшая эффективности. На рис.3 приведено время расчёта (в сек.) одной итерации для сетки 64×256 , 1000 частиц в ячейке в зависимости от числа процессоров.

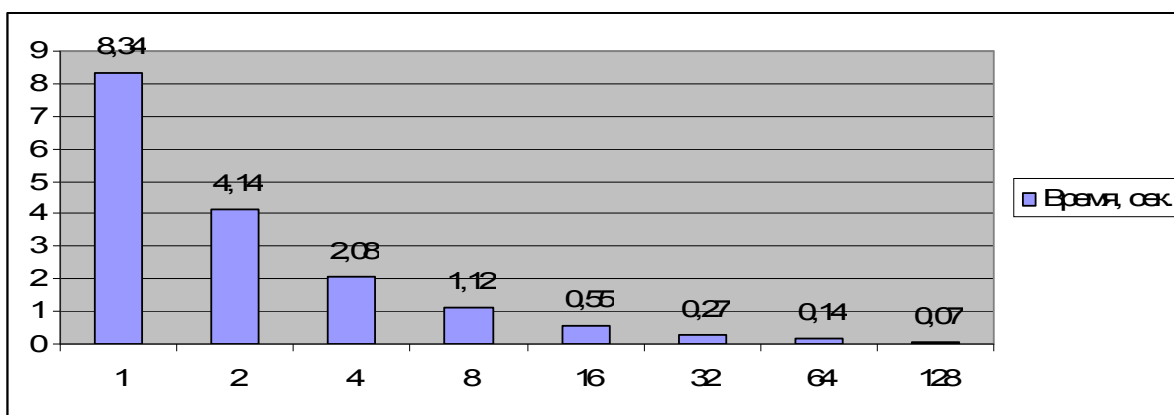


Рис. 3. Время расчёта (в сек.) одной итерации для сетки 64x256, 1000 частиц в ячейке в зависимости от числа процессоров.

Из рис.3 видно, что при равномерном распределении частиц области между процессорами, ускорение возрастает практически пропорционально числу процессоров (ускорение в 30,89, 59,57, 119,14 раза для 32, 64 и 128 процессоров соответственно). Однако такая хорошая масштабируемость получилось только потому, что мы рассмотрели лишь одну область. Если же частицы начинают перемещаться из одной подобласти в другую, нагрузка становится неравномерной.

Для определения того, насколько равномерно нагрузка распределяется между процессорами в случае, когда частицы перемещаются между процессорами хаотически, была рассмотрена следующая задача. Сетка 64x1024, 1000 частиц в ячейках, область разделена вдоль направления Y на 4 подобласти. В каждой подобласти используется 32 процессора. На рис.4 представлено среднее по процессорам время счёта одной итерации для 1000 итераций.

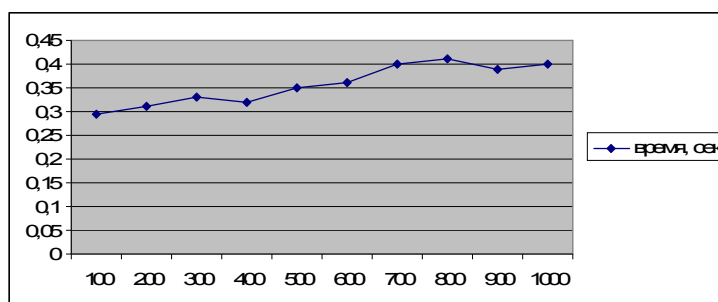


Рис. 4. Среднее по процессорам время счёта одной итерации на каждом шаге для 1000 временных шагов.

Из рис.4 видно, что время выполнения одной итерации может меняться с течением времени, однако расчёт каждого следующего шага не существенно отличается от времени расчёта текущего шага. Это связано с тем, что частицы за одну итерацию могут перемещаться только в соседние ячейки.

Таким образом, необходимо провести планирование распределения частиц как внутри подобласти, так и между подобластями.

Одним из способов планирования распределения частиц внутри подобласти является использование технологии OpenMP, в которой разделение нагрузки между потоками происходит равномерно.

Проводилось тестирование гибридной реализации MPI+OpenMP для следующей задачи.

Область 128x256, 1000 частиц в ячейках, делится на 2 подобласти. Каждая подобласть рассчитывается одним MPI-процессом, который вызывает несколько OpenMP-потоков (от 2-х до 8-ми).

Время расчёта только MPI-программы на одну итерацию – 7,95 сек, с использованием 2,4,8 OpenMP-потоков – 5,12, 4,2, 3,96 сек соответственно. При этом использование 4-х MPI-процессов без OpenMP даёт время расчёта одной итерации 3,79 сек. Таким образом,

оказывается выгоднее использовать только MPI.

Планирование по распределению частиц проводилось А.Н.Андриановым и К.Н.Ефимкиным (ИПМ им. М.В.Келдыша) [4]. Ими было предложено равномерное распределение частиц по процессорам области исходя из общего числа частиц в области на каждом шаге. Это увеличит объём пересылок частиц между процессорами, но поскольку за одну итерацию между подобластями перемещается достаточно малое число частиц, этот подход кажется перспективным.

6. Заключение

В работе нами были описаны основные параллельные реализации двумерной модели, описывающей взаимодействие релятивистского электронного пучка с плазмой. Показано, что использование декомпозиции области на группы по 128x128 ячеек даёт ускорение в 2 раза по сравнению с другими реализациями. При большом размере сетки рекомендуется использование планирования распределения частиц. Как мы показали, в этом случае внутри каждой подобласти можно эффективно использовать до 128 процессоров. Таким образом, появляются широкие возможности для масштабирования задачи на десятки тысяч процессоров.

Литература

1. Астрелин В.Т., Бурдаков А.В., Поступаев В.В. Подавление теплопроводности и генерация ионно-звуковых волн при нагреве плазмы электронным пучком // Физика плазмы, 1998, том 24, № 5, с. 45-462.
2. Вшивков В.А., Вшивков К.В., Дудникова Г.И. Алгоритмы решения задачи взаимодействия лазерного импульса с плазмой // Вычислительные технологии, том 6, № 2, с. 47-63, 2001.
3. Villasenor J., Buneman O. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solver // Computer Phys. Comm. 1992. Vol. 69. P. 306-316.
4. Андрианов А.Н., Ефимкин К.Н. Подход к параллельной реализации метода частиц в ячейках // Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша №9 за 2009 г., Москва.