

Параллельная реализация магнитоиндукционных PIC–алгоритмов

Л. В. Бородачев*

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2
(Статья поступила 25.04.2016; Подписана в печать 05.05.2016)

Предлагается подход к параллельной реализации низкочастотных PIC–алгоритмов, учитывающий особенности безызлучательного (дарвинского) приближения электромагнитных полей разреженной плазмы. Обсуждаются его достоинства и специфика адаптации к основным типам программно-аппаратных платформ для высокопроизводительных вычислений.

PACS: : 52.65-y

УДК: 519.6:533.9

Ключевые слова: метод макрочастиц, модель Власова–Дарвина, PIC–алгоритм, параллельные вычисления, мультипроцессорные ЭВМ.

Как известно, не смотря на появление супер–ЭВМ, компьютерные эксперименты по методу макрочастиц в электромагнитных задачах физики плазмы, по-прежнему, остаются уникальными: во-первых, требуемое (с позиций достоверности расчетов) количество частиц растет как степень размерности пространства и, во-вторых, учет высокочастотных эффектов поля приводит к мелкомасштабной дискретизации пространственно–временного континуума. Отсюда понятен большой интерес к длинноволновым и фазово–несимметричным безызлучательным или магнитоиндукционным моделям [1], численно реализуемым в виде наиболее эффективных PIC–алгоритмов. Очевидно, что корректная адаптация последних к программно-аппаратным платформам с технологией параллельного счета должна учитывать специфику безызлучательных постановок. В частности, возможность использования относительно грубых пространственных сеток, число узлов которых (на измерение) может быть при необходимости существенно увеличено за счет перехода к несимметричной по фазовой геометрии формулировке задачи без потери ее физической адекватности [2]. Эта особенность, во многом определяющая организацию потоков выполнения («нитей»), позволяет распараллеливать магнитоиндукционные (дарвинские) алгоритмы по Методу Разделения Частиц, отличному от общепринятых Методов Декомпозиции Области [3]. Суть подхода в том, что все частицы дискретной пламенной модели равными долями распределяются по вычислительным узлам, каждый из которых обладает собственной копией пространственных сеток. По завершении временного шага самосогласованной модельной системы эти узлы суммируют вклады своих частиц в единые массивы значений источников (плотности заряда, тока и т.д.), которые передаются на выделенный (корневой) узел для решения полевых уравнений с последующей обратной широковещательной рассылкой найденных значений

полей, определяющих новое продвижение частиц.

Отметим преимущества данной методики распараллеливания, графически представленной на рис. 1.

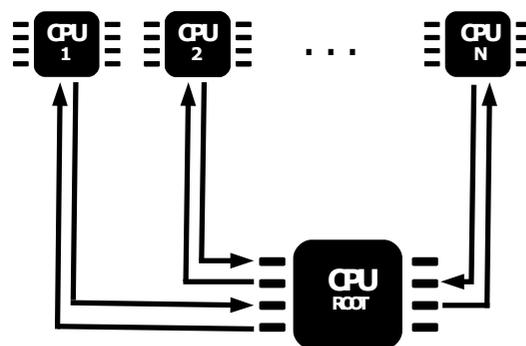


Рис. 1: Графическая иллюстрация метода разделения частиц

В типичном компьютерном эксперименте на базе PIC-метода большая часть вычислительных затрат (порядка 90%) приходится именно на продвижение частиц и получение сеточных источников, а не на вычисление полей, и таким образом, эффективное распараллеливание лишь этой части вычислений позволяет добиться существенного ускорения счета в целом. При этом достигается наиболее равномерное распределение данных и вычислений по узлам, связанным с обработкой частиц. Последнее весьма актуально для методов декомпозиции области, где разбалансировка вычислительной нагрузки процессоров, априори возникающая в силу локальных неоднородностей модельной среды, требует использования значительно более сложных методик распараллеливания на основе динамической сегментации. При этом для оптимизации процедуры перехода частиц из одного сегмента области в другой необходимо построение специальных карт межпроцессорных пересылок. Очевидно, что указанные приемы весьма существенно увеличивают коммуникационные затраты, ставя под вопрос общую рентабельность такого расчета.

*E-mail: borodach2000@mail.ru

Программная реализация метода разделения частиц намного проще по сравнению с методом декомпозиции области, где существуют алгоритмические проблемы, связанные как с оптимизацией процедуры пересылки частиц из одного процессорного элемента в другой, так и с перестроением текущих сегментов модельной области. При этом структура межпроцессорных взаимодействий по методу разделения частиц допускает относительно несложную интеграцию в уже существующие последовательные коды, которые легко адаптируются к мультипроцессорным ЭВМ как с распределенной, так и с общей памятью.

Коммуникационные издержки данного метода, в отличие от метода декомпозиции области, не зависят ни от количества модельных частиц, ни от их температуры и потоковой скорости, а являются лишь функцией размера сетки. При этом эффективность параллельного кода резко возрастает с увеличением отношения числа частиц к числу сеточных узлов, ибо повышается не только экономичность расчета (что очевидно из вышесказанного), но и его достоверность в силу значительного улучшения физических свойств (бесстолкновительности, идеальности и стохастичности) модельной системы.

Однако, наличие одного выделенного (корневого) узла для решения полевых уравнений ограничивает масштабируемость кода критической точкой, после которой рост количества используемых процессоров будет приводить к падению счетной эффективности кода. Помимо этого, каждый вычислительный узел снабжается полной копией пространственных сеток, что, вообще говоря, ограничивает размер модельной области объемом локальной оперативной памяти используемого кластера. (В более легкой форме эта проблема существует и в методах декомпозиции, где величина оперативной памяти вычислительного модуля определяет максимально возможный размер сегмента и, тем самым, лимитирует минимально необходимое число процессоров, требуемых для организации параллельного счета.)

Вместе с тем практика успешной эксплуатации 2.5-мерного параллельного кода *DarWin* [4], использующего предложенную методику, на кластере СКИФ МГУ «Чебышев» позволяет говорить, что указанные ограничения являются сравнительно слабыми. Действительно, оценки, полученные при численном решении модельной задачи об эволюции электронно-протонной плазмы с анизотропным распределением тепловых скоростей ($N_{part} \approx 2.5 \cdot 10^9$, $N_{cell} = 512 \times 512$) на кластере, имеющем типовой объем локальной памяти 8 гигабайт, с использованием различ-

ного числа процессорных ядер (от 1 до 1024), дают критическую точку масштабируемости в 512 процессоров и предел по линейному размеру сетки в 4096 узлов [5]. Величины более, чем достаточные при исследованиях в области низкочастотной плазмифизики методом компьютерного эксперимента с использованием кластера в стандартном (пакетном) режиме обработки задач.

В заключение выскажем ряд соображений по реализации метода на мультипроцессорных системах основных типов. Для координации вычислительных процессов в массивно-параллельных компьютерах, по видимому, оптимален интерфейс обмена сообщениями MPI (Message Parsing Interface). Реализованный в виде сторонних библиотек, MPI является стандартом *de facto* в современных высокопроизводительных вычислениях и его применение обеспечивает легкую переносимость кода на программно-аппаратные платформы, работающие под управлением наиболее распространенных ОС Linux и Unix. Для SMP-кластеров, состоящих из многопроцессорных узлов, возможны две стратегии: распараллеливание с использованием только лишь MPI и гибридный подход, при котором в пределах одного вычислительного узла используется стандарт более быстрых обменов OpenMP (Open Multi-Processing), а межузловые коммуникации осуществляются посредством интерфейса MPI.

Отдельно отметим специфику метода для супер-ЭВМ с общей памятью. Здесь реализация параллельного счета существенно упрощается, поскольку сеточные значения доступны любому из процессоров. Существует, однако, большая вероятность попытки одновременной записи множеством процессоров сеточных вкладов своих частиц в массив источников, что, вообще говоря, дает непредсказуемый результат. Чтобы избежать этой проблемы, процедура записи должна быть помечена как критическая секция, что создает ее очередность по процессорам. Однако сами процедуры входа в критическую секцию и синхронизации процессоров оказываются весьма затратными. В виде альтернативы можно проводить расчет источников, используя для каждого процессора временные массивы, которые далее суммировать в единый, причем параллельно по не пересекающимся между процессорами множествам индексов массива. Указанный прием позволяет существенно поднять эффективность параллельных вычислений, однако требует определенного расхода общей памяти на временные массивы.

[1] *Darwin C. G.* Phil. Mag. **39**. P. 537. (1920).

[2] *Бородачев Л. В.* Мат. Моделирование **17**, № 9, С. 53. (2005).

[3] *Walker D. W.* The Hierarchical Spatial Decomposition of Three Dimensional Particle-in-Cell Plasma Simulations on MIMD Distributed Memory Multiprocessors / Oak Ridge

- National Laboratory, report ORNL/TM-12071. (1992).
- [4] Borodachev L. V., Kolomiets D.O. J. Plasma Phys. **77**, P.277. (2011).
- [5] Бородачев Л.В., Коломиец Д.О. Комп. Исследования и Моделирование. **7**, № 1, С. 61. (2015).

Parallel implementation of magnetoinduction PIC-algorithms

L.V. Borodachev

*Department of Mathematics, Faculty of Physics,
M.V.Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia
E-mail: borodach2000@mail.ru.*

The approach to parallel implementation of low-frequency PIC-algorithms is proposed, taking into account peculiarity of the nonradiative (Darwin) field approximation. Its advantages and specifics of adaptation to the base computer types for high performance calculations are discussed.

PACS: 52.65-y

Keywords: Particle Mesh method, Vlasov-Darwin model, PIC-algorithm, parallel calculations, supercomputer.

Received 25.04.2016.

Сведения об авторе

Бородачев Леонид Васильевич — докт. физ.-мат. наук, доцент, доцент; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: borodach2000@mail.ru.