

**Высокопроизводительные вычисления в дискретном дарвинском моделировании**

Л. В. Бородачев\*

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики  
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2*

Предлагается подход к параллельной реализации низкочастотных PIC-алгоритмов, учитывающий особенности безызлучательного (дарвинского, магнитоиндукционного) приближения электромагнитных полей разреженной плазмы. Обсуждаются его достоинства и возможные ограничения.

PACS: 52.65-у.

УДК: 519.6:533.9.

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

Как известно, наиболее экономичный подход к высокопроизводительным вычислениям реализует технология параллельного счета [1]. К сожалению, в настоящее время наиболее распространенные супер-ЭВМ (кластерного типа) по сути лишены средств рационального распараллеливания сложных программ (в частности, по PIC-методу [2]) на уровне их трансляции.

Для достижения приемлемой эффективности расчетов на современных мультипроцессорах с распределенной памятью требуются методики построения кодов с заданным параллелизмом и продуманной системой межузловых связей, определяемых особенностями реализуемых дискретных алгоритмов. Это положение особенно актуально для длинноволновой по характеру, безызлучательной по содержанию и фазово-несимметричной по форме модели Власова–Дарвина [3], особенно в случае ее наиболее сложной неявной численной аппроксимации по методу макрочастиц [4], предполагающей активное использование итерационных процедур как при численном интегрировании уравнений движения частиц, так при конечно-разностном решении уравнений поля.

В настоящей работе предлагается эффективный подход к распараллеливанию дарвинских (магнитоиндукционных) PIC-алгоритмов, названный Методом Разделения Частиц (МРЧ). Его идеология явно учитывает специфику безызлучательных постановок, в частности, возможность использования относительно грубых пространственных сеток, число узлов которых (на измерение) может быть при необходимости существенно повышено за счет перехода к дробномерной (с редукцией конфигурационного пространства) формулировке задачи без потери ее физической адекватности [5].

Суть метода в том, что все частицы дискретной пламенной модели равными долями распределяются по вычислительным узлам, каждый из которых обладает собственной копией сеточных значений полей. По завершении временного шага самосогласованной системы эти узлы суммируют вклады своих частиц в единые массивы значений источников (плотности заряда, тока и т. д.), которые передают-

ся на выделенный (корневой) узел для решения полевых уравнений с последующей обратной широко-вещательной рассылкой найденных значений полей, определяющих новое продвижение частиц.

Отметим преимущества данной методики распараллеливания в сравнении с общепринятыми Методами Декомпозиции Области (МДО) [6], базирующимися на идее фрагментации модельной области с жесткой привязкой каждого фрагмента (домена), своему счетному модулю кластера.

Во-первых, 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, так что актуальная для методов на основе сегментации области проблема разбалансировки вычислительной нагрузки здесь по сути не стоит.

Во-вторых, 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 получением корректного решения полевых уравнений с использованием неявных разностных схем, особенно в дробно-мерных постановках [7].

В-третьих, структура межпроцессорных взаимодействий по методу разделения частиц допускает относительно несложную, в сравнении с методом декомпозиции области, интеграцию в уже существующие последовательные коды, которые легко адаптируются к мультипроцессорным ЭВМ как с распределенной, так и с общей памятью.

В-четвертых, коммуникационные издержки данного метода, в отличие от МДО, не зависят ни от количества модельных частиц, ни от их температуры и потоковой скорости, а являются лишь функцией размера сетки. При этом более предсказуемыми становятся оценки общего времени счета конкретной задачи, что является дополнительным плюсом.

\*E-mail: borodach2000@mail.ru

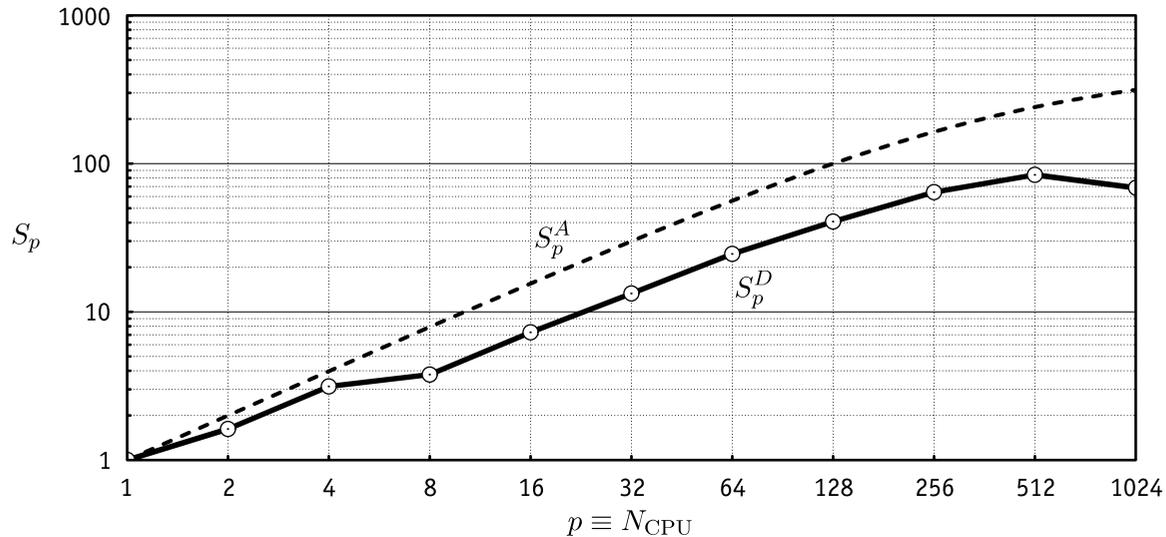


Рис. 1: Зависимость ускорения вычислений от числа процессоров (ядер).  $S_p^D$  — реальное ускорение кода **DarWin**,  $S_p^A$  — теоретически возможное ускорение по закону Амдала

Наконец, и это существенно, эффективность параллельного кода по МРЧ 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 (идеальности, бесстолкновительности 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. (Заметим, что в более легкой форме эта проблема присутствует и в методе декомпозиции: попытка решения полной электромагнитной задачи большого пространственного масштаба, предполагающая значительную сегментацию области, может привести к резкому доминированию коммуникационных затрат в общем объеме вычислений и, как следствие, крайне низкой рентабельности такого расчета.)

Вместе с тем практика успешной эксплуатации 2.5-мерного параллельного кода (например, см. работу [8]), использующего предложенную методику, на кластере СКИФ МГУ «Чебышёв» 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 ( $N_{part} \approx 2.5 \times 10^9$ ,  $N_{cell} \approx 512 \times 512$ ) на кластере, имеющем типовой объем локальной памяти 8 гигабайт, с использованием различного 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.

Отметим при этом, что линейный по сути характер реальной кривой ускорения (рис. 1), практически совпадающей с кривой теоретического прогноза по закону Амдала [1], является безусловным практическим подтверждением эффективности предлагаемой методики распараллеливания безызлучательных (дарвинских) PIC-алгоритмов (локальное расхождение указанных кривых объясняется использованием кластера с узлами, состоящими из четырех процессоров, попарно коммутируемых на общую память вычислительного модуля. При этом внутриузловая коммуникация в рамках локального стандарта OpenMP, как известно, существенно экономичнее и быстрее межузловой на базе общепринятого интерфейса MPI).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 16-01-00690 А)

[1] Воеводин В. В., Воеводин Вл. В. Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2002.

[2] Harlow F. H. Methods Comput. Phys. (Edited by Alder B.

- Fernbach S., Rotenberg M.) **3**. P.319. New York: Acad. Press, 1964.
- [3] *Darwin C. G.* Phil. Mag. **39**. P. 537. (1920).
- [4] *Бородачев Л. В.* Мат. Моделирование. **17**, №9, С. 53. (2005).
- [5] *Бородачев Л. В., Коломиец Д. О.* Комп. Исследования и Моделирование. **7**, № 1. С. 61. (2015).
- [6] *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.
- [7] *Бородачев Л. В.* ЖВМ и МФ. **31**, № 6. С. 934. (1991).
- [8] *Borodachev L. V., Kolomiets D. O.* J. Plasma Phys. **77**. P. 277. (2011).

## High performance calculations at the discrete Darwin simulation

**L. V. Borodachev**

*Department of mathematics, Faculty of Physics, 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, magnetoinduction) field approximation. Its advantages and possible constrains.

PACS: 52.65-у.

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

### Сведения об авторе

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