

Параллельные вычисления в задачах радиационной магнитогидродинамики*

С.Н. Болдырев, А.С. Болдарев, О.Г. Ольховская,
С.В. Дьяченко, Е.Л. Карташёва, В.А. Гасилов

В работе рассматривается применение высокопроизводительных вычислений при моделировании нестационарных процессов в сильно излучающей плазме. На примере программного комплекса MARPLE, разработанного в ИММ РАН и предназначенного для численного решения задач радиационной МГД, описываются используемые в нём модели и схема применения параллельных вычислений для расчёта переноса энергии излучения. Приведены результаты тестовых расчётов на кластерных системах. Рассматривается стратегия дальнейшего распараллеливания совместных вычислений по всем учитываемым физическим процессам.

1. Введение

Современные задачи, связанные с сильноточными импульсными разрядами, относятся к числу самых сложных как в теории, так и в практике компьютерного моделирования. Применение высокопроизводительных вычислений представляется весьма актуальным для моделирования таких разномасштабных нелинейных процессов, как неустановившиеся течения в сильно излучающей многозарядной плазме. Заметная доля исследований в этой области посвящена численному моделированию пинчей, образуемых в результате электрического взрыва холодной материи (проволочные сборки, газовые струи и др.). Интерес к этим исследованиям в значительной мере вызван впечатляющими результатами по выходу рентгеновского излучения, полученными в Sandia National Laboratory (США) [1] на проволочных каскадах. Целью численных исследований в данной области является изучение нестационарных процессов в ходе электрических разрядов высокой интенсивности и многопараметрическая оптимизация экспериментальных схем.

2. Математическая модель и численные методы

Численное моделирование сильно излучающей плазмы непосредственно связано с разработкой и совершенствованием исследовательских программных кодов. Так, в ИММ РАН создан программный комплекс MARPLE (Magnetically Accelerated Radiative PLasma Explorer) [2]. Используемая в нём модель основана на двумерной системе уравнений в цилиндрических координатах (r, z) , при этом также допустимы (r, φ) или Декартова (x, y) геометрии. Течение плазмы рассматривается в рамках одножидкостной магнитогидродинамической модели, описываемой известной теорией Брагинского. Уравнения МГД записываются в т.н. 2.5-размерном виде, где векторы поля течения представлены всеми тремя компонентами: скорость $\vec{w} = (w_r, w_\varphi, w_z)$, магнитная индукция $\vec{B} = (B_r, B_\varphi, B_z)$, напряжённость электрического поля $\vec{E} = (E_r, E_\varphi, E_z)$. Учитывается анизотропия диссипативных процессов в присутствии магнитного поля. В общем энергетическом балансе учитывается взаимодействие между электронами, ионами и излучением. Система уравнений включает в себя уравнение переноса излучения и замыкается при помощи баз данных и/или аналитического описания состояния плазмы, коэффициентов процессов переноса, спектральных коэффициентов излучения и поглощения. В зависимости от исследуемой проблемы система может быть также дополнена уравнением, описывающим изменение тока в полной электрической цепи. В типичных задачах импульсного разряда цепь состоит из электрического генератора, подводящих элементов и разрядной камеры.

*Работа выполнена при поддержке ОМН РАН (Гос. контракт 10002-251/ОМН-03/026-023/240603-806) и РФФИ (Грант № 05-01-00510).

2.1. Система уравнений 2-температурной МГД

Идеальная МГД:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{w}) &= 0, & \frac{\partial \rho w_i}{\partial t} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \Pi_{ik} &= 0, \\ \Pi_{ik} &= \rho w_i w_k + P \delta_{ik} - \frac{1}{4\pi} \left(B_i B_k - \frac{1}{2} B^2 \delta_{ik} \right), \\ \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \nabla \times (\vec{w} \times \vec{B}) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho w^2 + \frac{B^2}{8\pi} \right) + \nabla \vec{q} &= 0, \\ \vec{q} &= \left(\rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho w^2 + P \right) \vec{w} + \frac{1}{4\pi} \vec{B} \times (\vec{w} \times \vec{B}), & P_{e,i} &= P_{e,i}(\rho, \varepsilon_{e,i}).\end{aligned}$$

Диссипативные процессы:

$$\begin{aligned}\vec{E} &= \frac{\vec{j}_{\parallel}}{\sigma_{\parallel}} + \frac{\vec{j}_{\perp}}{\sigma_{\perp}}, \\ \text{rot } \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} = \frac{4\pi}{c} \hat{\sigma} \vec{E}, & \quad \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\text{rot } \vec{E}, \\ \frac{\partial \rho \varepsilon_e}{\partial t} &= -\text{div}(\hat{\kappa}_e \text{grad } T_e) + Q_{ei} + G_J + G_R, \\ \frac{\partial \rho \varepsilon_i}{\partial t} &= -\text{div}(\hat{\kappa}_i \text{grad } T_i) - Q_{ei}, & \varepsilon &= \varepsilon_i + \varepsilon_e, & P &= P_i + P_e.\end{aligned}$$

2.2. Схема разделения по процессам и численные алгоритмы

Идеальная МГД	Диссипативные процессы	
	Диффузия магнитного поля, теплоперенос, электрон-ионный обмен, Джоулево тепло	Перенос энергии излучения
Локальные процессы	Квази-локальные процессы	Нелокальные процессы
Явная схема	Неявная схема	Явная схема дробных шагов
Схема TVD высокого разрешения с коррекцией потока	Интегро-интерполяционные схемы на конечных объёмах	Характеристическая схема
Эволюция по времени: схема предиктор-корректор 2-го порядка		

Программный комплекс позволяет решать задачи в областях сложной геометрии с применением нерегулярных треугольных и четырёхугольных сеток, где все физические величины хранятся в узлах сетки. Законы сохранения массы, импульса и энергии аппроксимируются при помощи метода конечных объёмов. Пример расчётной сетки с конечными объёмами изображён ниже на рис.1.

Система МГД решается при помощи обобщённой TVD-схемы Лакса-Фридрихса, предназначенной для применения на нерегулярных сетках [3]. В случае регулярной триангуляции эта схема обеспечивает второй порядок аппроксимации пространственных производных (третий порядок достижим при специальном подборе антидиффузионных лимитеров).

Для решения параболических уравнений, описывающих магнитную диффузию и теплопроводность, нами разработаны новые конечно-объёмные схемы, построенные по аналогии со смешанным методом конечных элементов. Интегрирование по времени проводится явное, при этом процедура предиктор-корректор позволяет достигнуть второго порядка точности. Шаг по времени ограничен критерием Куранта.

2.3. Перенос энергии излучения

Перенос радиационной энергии описывается уравнением спектральной интенсивности излучения, которое для квазистационарного поля в цилиндрической геометрии и при условии симметрии по азимутальной координате выглядит следующим образом:

$$\sin \theta \left(\cos \varphi \frac{\partial I_\omega}{\partial r} + \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial I_\omega}{\partial \varphi} \right) + \cos \theta \frac{\partial I_\omega}{\partial z} = -\aleph_\omega I_\omega + j_\omega.$$

Уравнение решается посредством полуаналитического сеточно-характеристического интерполяционного алгоритма, основанного на обобщённой модели Шварцшильда-Шустера. В принятой модели не учитываются процессы рассеяния. Аналитическое решение вдоль характеристики строится при помощи двухгруппового углового приближения функции распределения фотонов по переменной φ [4, 5]. В результате получается семейство уравнений для интенсивности излучения в направлениях вперёд/назад $I^{f/b}$:

$$\frac{\cos \theta_n - \cos \theta_{n+1}}{\Delta \theta_n} \left(\frac{\partial I_{n+1/2}^f}{\partial r} + \frac{I_{n+1/2}^f}{r} \right) + \frac{\sin \theta_{n+1} - \sin \theta_n}{\Delta \theta_n} \frac{\partial I_{n+1/2}^f}{\partial z} = -\aleph I_{n+1/2}^f + j,$$

$$\frac{\cos \theta_{n+1} - \cos \theta_n}{\Delta \theta_n} \left(\frac{\partial I_{n+1/2}^b}{\partial r} + \frac{I_{n+1/2}^b}{r} \right) + \frac{\sin \theta_{n+1} - \sin \theta_n}{\Delta \theta_n} \frac{\partial I_{n+1/2}^b}{\partial z} = -\aleph I_{n+1/2}^b + j.$$

С целью учёта оптических свойств вещества полный изучаемый спектр частот разбивается на k диапазонов, и уравнения решаются для каждого из них.

Энергетическое взаимодействие между полем излучения и средой выражается через дивергенцию потока излучения, входящую в уравнение общего баланса энергии в качестве источника. Плотность энергии излучения (член G_R в приведённой выше системе уравнений) выражается при этом следующим образом:

$$G_R = \sum_{s=1}^k \frac{\pi}{c} \sum_{n=1}^N \left(I_{n+1/2}^f + I_{n+1/2}^b \right) (\cos \theta_n - \cos \theta_{n+1}).$$

Для расчёта переноса энергии излучения строится специальная сетка лучей, представляющая собой совокупность семейств параллельных прямых. Каждое семейство отличается углом наклона к осям координат и плотностью расположения линий. Таким образом эта сетка вводит некоторую дискретизацию расчётной области в плоскости (r, z) и по отношению к углу θ ($0 \leq \theta < \pi$), необходимую для численного интегрирования уравнения переноса излучения в соответствии с описанной моделью. Сетка лучей накладывается на исходную сетку, при этом расчётными точками становятся точки пересечения лучей с гранями конечных объёмов. Фрагмент сетки лучей (для 12 угловых секторов) также изображён на рис.1. Интенсивности в направлениях вперёд/назад вдоль луча, направленного под углом $\theta_{n+1/2}$:

$$I_{j+1}^f = \left(I_j^f - J_j \right) \exp(-\aleph_j l_j) + J_j, \quad I_j^b = \left(I_{j+1}^b - J_j \right) \exp(-\aleph_j l_j) + J_j.$$

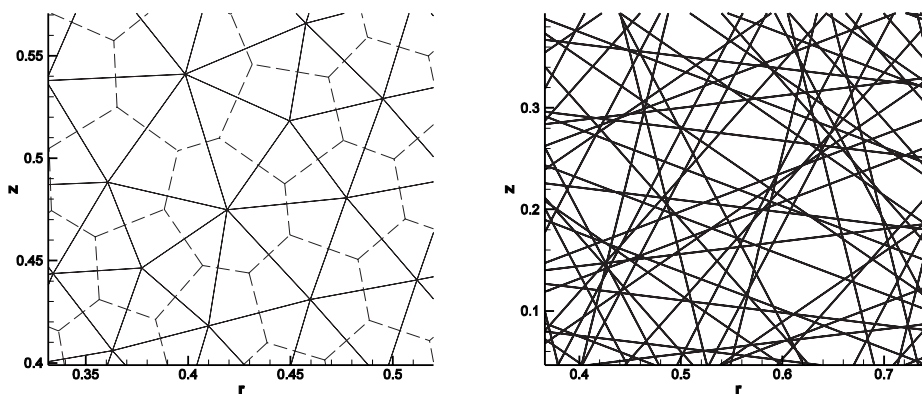


Рис. 1. Фрагменты треугольной сетки с конечными объёмами и сетки лучей.

3. Параллельная реализация

Описанный класс задач отличается большой вычислительной трудоёмкостью, связанной с количеством учитываемых физических процессов и соответствующих уравнений. Численные расчёты потребляют здесь значительное количество процессорного времени даже на сравнительно небольших сетках, при этом часто приходится выполнять довольно длительные вычисления, поскольку исследуемые процессы являются существенно нестационарными. В то же время в промышленных приложениях обычно требуется проводить целые серии похожих расчётов. Поэтому использование нами высокопроизводительной вычислительной техники и внедрение в программный код параллельных технологий является не только интересной с научной точки зрения задачей, но и просто насущной необходимостью.

Одним из важных требований, предъявляемых к разрабатываемому коду, является точный расчёт переноса энергии излучения, включая детальную передачу спектра, в силу исключительной значимости этого при проектировании мощных импульсных источников рентгеновского излучения. В этих целях весь учитываемый спектр делится на ряд частотных диапазонов, числом от десятков до сотен. Требуется рассчитать поле излучения, с учётом углового распределения, для каждого из них. При этом перенос энергии вычисляется независимо в каждом диапазоне, и затем соответствующие величины складываются. Кроме того, как правило, сетка лучей содержит намного больше расчётных точек, чем основная. По этим причинам расчёт переноса излучения является одной из наиболее трудоёмких частей в численном решении задач радиационной МГД. Результаты замеров при выполнении последовательного кода показывают, что в зависимости от конкретной задачи до 80-90% процессорного времени может расходоваться на расчёт переноса излучения. Типичные цифры для тестовой задачи (см. ниже) при 100 спектральных диапазонах представлены в таб.1.

Таблица 1. Вычислительные затраты на разных физических процессах.

Идеальная МГД:	3.4%
Диффузия магнитного поля:	4.7%
Теплопроводность + e-i обмен:	3.0%
Джоулево тепло:	4.0%
Перенос энергии излучения:	84.9%

Исходя из этого, наши первоочередные усилия по распараллеливанию кода были направлены именно на расчёт переноса излучения. Здесь следует отметить, что в приведённой выше схеме разделения физических процессов перенос излучения занимает особое место, поскольку при его расчёте основная часть вычислений проводится на специальной сетке лучей и имеет существенно нелокальный характер. Поэтому геометрический параллелизм, как средство распределения вычислительной нагрузки, оказывается здесь недостаточно эффективным. Более подходящим в данном случае является разделение по спектру. Используемое представление спектра в виде совокупности частотных диапазонов предполагает выполнение довольно большого объёма однородных вычислений с разными наборами коэффициентов излучения и поглощения для каждого диапазона. Целесообразно разнести эти вычисления по процессорам, а затем собрать результаты воедино, используя тот факт, что все частотные диапазоны дают независимый и однородный вклад в общий поток энергии излучения.

Таким образом, общий объём вычислений на каждом шаге по времени может быть условно поделён на две разные части: все вычисления на основной треугольной сетке, и вычисления на сетке лучей. В связи с тем, что распараллеливание вычислений на основной сетке пока не завершено, все процессоры выполняют сейчас одновременно одну и ту же работу. Фактически это не приводит ни к каким потерям времени, т.к. на однородном кластере эта часть расчётов начинается и заканчивается синхронно, зато на начало второй части все процессоры уже обладают необходимыми (одинаковыми) данными, не прибегая к дополнительным пересылкам. После этого вычисления на сетке лучей осуществляются в параллельном режиме, при этом каждый процессор рассчитывает поле излучения в своём наборе спектральных диапазонов, со своими коэффициентами. Все эти вычисления единообразны и независимы, обмен данными по ходу расчёта не требуется. Это приводит к идеальной эффективности распараллеливания на данном этапе расчётов, при условии, что количество диапазонов кратно числу процессоров. По окончании вычислений необходимо просуммировать плотность энергии излучения по всем частотам, для чего требуется один общий обмен данными в масштабе одной величины (G_R), заданной в ячейках основной сетки.

Параллельные вычисления на кластерных системах (с распределённой памятью) организованы при помощи среды MPI, что является фактическим стандартом на сегодняшний день и позволяет сделать код хорошо переносимым при сохранении приемлемой эффективности. Однако сама по себе библиотека, особенно в первой версии стандарта, не использует многие возможности объектно-ориентированного программирования, которые могли бы заметно облегчить написание параллельных программ [6]. С другой стороны, библиотека содержит множество эффективных специализированных функций с богатым набором опций, но на практике многие исследователи используют в своей работе только некоторый небольшой набор из предоставляемых MPI возможностей, ориентируясь на свои конкретные задачи. Чтобы упростить использование библиотеки авторами основного расчётного кода, разработан промежуточный интерфейс, который кроме того позволяет использовать MPI в стиле языка C++, на котором написан практически весь код MARPLE.

4. Практические результаты

Программный комплекс был успешно испытан в ходе расчётов ряда задач на двух кластерных системах, установленных в ИММ РАН. Обе системы представляют собой самостоятельно собранные кластеры под управлением ОС Linux на платформе Intel¹.

Результаты, полученные в серии тестовых расчётов, представлены в таб.2. В данной

¹Первый кластер состоит из 26 модулей, объединённых сетью Gigabit Ethernet, в каждом из которых находится по два процессора Intel Xeon 3 GHz и по 2 Gb оперативной памяти. Второй кластер содержит 14 модулей, в каждом из которых — по 4 Gb ОЗУ и по два двухъядерных процессора Xeon 2.66 GHz.

Таблица 2. Результаты распараллеливания.

	Число процессоров				
	1	2	4	10	20
Полное время (100%)	48.82 с	29.51 с	18.76 с	13.56 с	11.16 с
Вычисления на сетке лучей	41.44 (85%)	20.8 (70%)	10.1 (54%)	3.94 (29%)	1.89 (17%)
Обмен данными	0 (0%)	0.29 (1.0%)	0.51 (2.7%)	0.55 (4.1%)	0.58 (5.2%)
Ускорение на сетке лучей	1.00	1.99	4.10	10.52	21.90
Общее ускорение	1.00	1.65	2.60	3.60	4.37
Общая эффективность	100%	83%	65%	36%	22%

задаче треугольная сетка содержит 21221 узел, а сетка лучей состоит из 6160 лучей с общим количеством расчётных точек равным 1054553. Количество спектральных диапазонов в этих расчётах было взято равным 100. Времена, выраженные в секундах, относятся к вычислению одного шага по времени на первом из упомянутых кластеров.

Из таблицы видно, что общая эффективность быстро снижается с увеличением числа процессоров, хотя та часть вычислений, которая выполняется на сетке лучей, показывает ожидаемое линейное ускорение, а временные затраты на последующий сбор данных вполне адекватны. Это является очевидным следствием того, что из всего кода пока распараллелена только одна, хоть и наиболее трудоёмкая часть. Несмотря на то, что на одном процессоре она занимает 85% расчётного времени, эта пропорция быстро меняется с увеличением числа процессоров. По этой причине для небольшого числа спектральных диапазонов параллельное вычисление радиационного переноса даёт весьма ограниченный эффект. Так, например, в данной задаче изначально мы использовали 20 диапазонов, при этом доля расчётов на сетке лучей составляла около 50% от общего времени, — соответственно, при этом нам было бы сложно достичь ускорения даже вдвое. Очевидно, выполняя в параллельном режиме только часть вычислений, рано говорить о масштабируемости, однако следует признать, что и ускорение в несколько раз имеет для нас большое практическое значение.

На следующей стадии работы мы планируем завершить распараллеливание остальных частей кода, отвечающих за расчёт всех учитываемых в модели физических процессов. При этом планируется и далее использовать схему разделения вычислений по процессам, чтобы обеспечить возможность применения в решении разных уравнений (в частности, гиперболических и параболических) различных численных методов, различных схем распараллеливания и, возможно, отдельных групп процессоров, а также разных вариантов организации итерационного процесса на шаге по времени. Таким образом, мы полагаем, что распараллеливание расчёта переноса излучения является лишь нашим первым шагом к тому, чтобы сделать весь программный комплекс MARPLE параллельно-ориентированным.

5. Заключение

Рассмотренные методы успешно применяются в численном моделировании имплозии гетерогенных лайнеров с образованием мощных рентгеновских импульсов. Соответствующие эксперименты проводятся на установке «Ангара-5-1» в ГНЦ РФ ТРИНИТИ [7]. Применение параллелизма в расчётах переноса энергии излучения позволяет нам уменьшить общее время вычислений в 2–4 раза при использовании небольших кластерных систем. На

практике это является существенным достижением, т.к. для оптимизации экспериментальных схем, как правило, требуется проводить большие серии однотипных расчётов. Другой положительный эффект заключается в том, что при параллельных расчётах число полос в спектре может быть значительно увеличено, а это непосредственно сказывается на точности и качестве численных результатов. Например, в описанной выше задаче при переходе к параллельному режиму вычислений число спектральных диапазонов было увеличено с 20 до 100.

Литература

1. J.P. Chittenden, et al. // Plasma Physics and Controlled Fusion, 2004. Vol.46, No.12B.
2. В.А. Гасилов и др. // Математическое моделирование, 2003. Т.15, №9.
3. Гасилов В.А., Дьяченко С.В. // Математическое моделирование: Современные методы и приложения. — М.: ЯНУС-К, 2004.
4. R. Siegel, J.R. Howell. Thermal radiation heat transfer. — McGraw-Hill, 1972.
5. Четверушкин Б.Н. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. — М.: Наука, 1985.
6. C. Hughes, et al. Parallel and Distributed Programming Using C++. — Addison-Wesley, 2004.
7. V.V. Alexandrov, et al. // Plasma Physics Reports, 2001. Vol.27, No.2.