

# Эффективность и масштабируемость параллельных алгоритмов расчета электростатического поля для численных методов типа Хокни\*

А. В. Позднеев

Факультет ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова

Данная работа продолжает цикл исследований автора, посвященных построению эффективных методов для математического моделирования в масс-спектрометрии. Поведение заряженных частиц в ионных ловушках моделируется методом частиц в ячейке. При этом на каждом шаге интегрирования уравнений движения требуется выполнять решение уравнения Пуассона. Следует подчеркнуть, что на движение ионов оказывают влияние как сила со стороны статического поля ловушки, так и поле зарядов, индуцированных на ее стенках, и кулоновские силы межйонных взаимодействий. В современных масс-спектрометрах предъявляются жесткие требования к точности расчета электрических полей. Все это обуславливает крайнюю важность разработки параллельных алгоритмов расчета электрических полей на сверхгустых сетках.

В предыдущей работе автором было выполнено исследование алгоритма для метода типа Хокни на системе Blue Gene/P. Алгоритм состоял из следующих шагов: (1 и 5) серия двумерных быстрых преобразований Фурье (БПФ), (2 и 4) межпроцессные коммуникации, (3) решение систем с трехдиагональными матрицами (СТМ). Была показана его масштабируемость до тысяч процессоров и десятков миллиардов точек сетки. Однако до половины времени расчета занимали межпроцессные коммуникации типа «каждый–каждому», которые осуществлялись функцией `MPI_Alltoallv()` над коммуникатором `MPI_COMM_WORLD` [1].

Целью данной работы является модификация алгоритма, представленного в работе [2]. Основная идея состоит в следующем. Двумерные БПФ выполняются за три шага: сначала осуществляются одномерные БПФ по одному измерению, затем производятся межпроцессные обмены, потом — одномерные БПФ по другому измерению. Важная особенность такой схемы заключается в том, что межпроцессные обмены проходят в рамках непересекающихся подмножеств процессоров. Принципиальным преимуществом представляемого параллельного алгоритма является возможность решать задачу для граничных условий первого рода, а не только для периодических. Во-вторых, по одному из направлений осуществляется решение СТМ, что позволило впервые разработать эффективный алгоритм расчета поля в коаксиальной [3] трехмерной ионной ловушке типа ‘O-trap’. Масштабируемость алгоритмов исследуется на суперкомпьютерах, установленных в МГУ имени М. В. Ломоносова.

## Литература

1. Позднеев А.В. Исследование масштабируемости прямого метода решения уравнения Пуассона на вычислительной системе Blue Gene/P // Сб. тр. междун. суперкомп. конф. «Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи». — Новороссийск: Изд-во МГУ, 20–25 сентября 2010. — С. 123–132.
2. Chatelain P. et al. Billion vortex particle direct numerical simulations of aircraft wakes // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* — 2008. — Vol. 197. — Pp. 1296–1304.
3. Christopher I., Knorr G., Shoucri M., Bertrand P. Solution of the Poisson Equation in an Annulus // *J. Comput. Phys.* — 1997. — Vol. 131, no. 2. — Pp. 323–326.

\*Работа выполняется в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (государственные контракты П1317 от 09.06.2010, П958 от 20.08.2009 и 02.740.11.0196 от 07.07.2009).