

Исследование и поиск наиболее эффективных подходов к параллельному моделированию плазмы методом частиц в ячейках на кластерных системах*

С.И. Бастраков¹, А.А. Гоносков², Р.В. Донченко¹,
Е.С. Ефименко², А.С. Малышев¹, И.Б. Мееров¹

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского¹,
Институт прикладной физики РАН²

Ставится задача разработки программного обеспечения, предназначенного для моделирования плазмы методом частиц в ячейках (Particle-In-Cell) на современных кластерных системах. Исследование и поиск наиболее эффективных схем распараллеливания производится в рамках специфики приложений для решения наиболее актуальных задач современной физики сверхмощных лазеров. Приводятся результаты вычислительных экспериментов, показывающие корректность и характеризующие масштабируемость текущей реализации. Формулируются выводы и планы по дальнейшему развитию.

1. Введение

Теоретические исследования поведения вещества в экстремальных условиях, при которых происходит ионизация вещества, т.е. переход в состояние плазмы, приобретает все большее значение для решения многих прикладных и фундаментальных задач. Кроме традиционных задач вакуумной электроники, в последние годы активно развиваются исследования поведения плазмы, образующейся при ионизации вещества мишени, облучаемой сверхмощным лазерным импульсом. Этот процесс представляет большой интерес для целого ряда приложений, среди которых можно выделить лазерное ускорение заряженных частиц, концепцию быстрого поджига для управляемого термоядерного синтеза и генерацию излучения с уникальными характеристиками в труднодоступных частотных диапазонах. Новые результаты в этой области, в свою очередь, могут вывести на качественно новый уровень многие важные направления, среди которых создание компактных источников для адронной терапии при лечении онкологических заболеваний, создание фабрик короткоживущих изотопов для биоимиджинга, разработка приборов для исследования внутримолекулярных и внутриатомных процессов, а также поиск новых путей для фундаментальных исследований эффектов нелинейности вакуума.

Часто, в связи с высокой степенью нелинейности и геометрической сложностью задачи, исследование динамики плазменных структур основывается на моделировании плазмы методом частиц в ячейках [3]. Данный подход был развит и начал применяться уже более сорока лет назад, однако и сегодня продолжают активные исследования в области разработки новых алгоритмов с целью повышения эффективности вычислительных схем, снижению негативного влияния численных эффектов и расширению границ применимости метода [1, 2]. Основная специфика метода частиц в ячейках заключается в одновременной обработке принципиально разнородных массивов данных, содержащих информацию о координатах и скоростях заряженных частиц плазмы, и об электромагнитном поле, заданном в узлах дискретной решетки, представляющей часть трехмерного пространства. В отличие от большинства задач численного моделирования в физике, где справедлив принцип локальности взаимодействия, отсутствие однозначных путей упорядочивания обращений к памяти обуславливает сложность эффективной программной реализации, как для классических многопроцессорных вычислительных систем, так и для гетерогенных систем с использованием графических процессоров.

*Работа выполнена в лаборатории «Информационные технологии» ВМК ННГУ при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», госконтракт № 02.740.11.0839.

Целью настоящей работы является представление текущих результатов, полученных в рамках проекта, направленного на поиск и реализацию наиболее эффективных подходов к параллельному моделированию плазмы методом частиц в ячейках на кластерных системах.

2. Постановка задачи

Подход к моделированию плазмы методом частиц в ячейках основан на математической модели, в рамках которой плазма представляется ансамблем отрицательно заряженных электронов и положительно заряженных ионов, создающих и двигающихся под действием электромагнитных полей. Движение заряженных частиц описывается в рамках классических релятивистских уравнений движения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} &= q \left[\vec{E} + \frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{B}) \right] \\ \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} &= \vec{v} \end{aligned} \quad (1)$$

$$\vec{v} = \vec{p} \frac{1}{m} \left(1 + \left(\frac{\vec{p}}{mc} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}}$$

где m , q , \vec{r} , \vec{p} и \vec{v} – масса, заряд, координата в трехмерном пространстве, импульс и скорость частицы соответственно; \vec{E} , \vec{B} – векторы напряженности электрического и магнитного поля в точке нахождения частицы соответственно; $c \approx 2,998 \times 10^{10}$ см/с – скорость света. Эволюция шестикомпонентного векторного поля электромагнитных полей (\vec{E} , \vec{B}) описывается в рамках уравнений Максвелла, в которые входит векторное поле плотности тока \vec{j} , создаваемое частицами:

$$\begin{aligned} \text{rot} \vec{B} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ \text{rot} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \end{aligned} \quad (2)$$

Метод частиц в ячейках предполагает представление всего ансамбля частиц эквивалентным меньшим числом так называемых крупных частиц, имеющих такое же отношение заряда к массе, как у реальных частиц. Поскольку заряд и масса частицы входят в уравнения движения (1) только в виде отношения, такое представление обеспечивает полностью эквивалентную динамику плазмы в случае, если число крупных частиц достаточно велико. Обычно это позволяет обходиться моделированием динамики значительно меньшего числа частиц, чем реально присутствует в рассматриваемом объеме плазмы (известны задачи, в которых возникает необходимость моделирования динамики $\sim 10^9$ и более частиц в пространстве, представленном $\sim 10^8$ ячеек).

3. Метод решения

Расчетная область покрывается равномерной пространственной сеткой. Электрическое поле \vec{E} и плотность тока \vec{j} представляются значениями в узлах сетки, магнитное поле \vec{B} – значениями в центрах ячеек сетки. Также хранятся данные о наборе частиц, каждая частица определенного типа характеризуется положением и скоростью. Масса и заряд определяются типом частицы.

Используется классическая схема метода частиц в ячейках [1], включающая следующие этапы: инициализация, вычислительный цикл (взвешивание токов, интегрирование уравнений поля, интерполяция полей, интегрирование уравнений движения частиц), завершение работы (Рис. 1). Каждая итерация цикла соответствует одному шагу по времени.

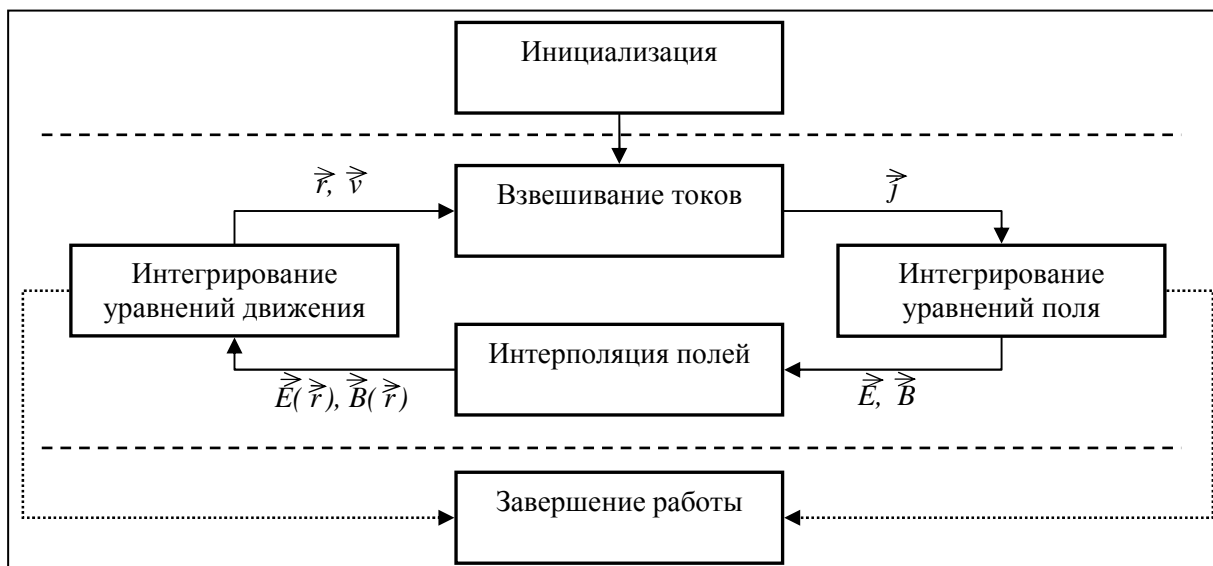


Рис. 1. Вычислительная схема метода

На этапе инициализации выполняются следующие подготовительные работы: чтение и интерпретация исходных данных, создание и инициализация необходимых структур данных. Взвешивание токов состоит в определении сеточных значений плотности тока \vec{j} по известным положениям и скоростям частиц. Каждая частица вносит вклад в значение плотности тока только в 8-ми ближайших к ней узлах сетки; для получения итоговых значений вклады всех частиц суммируются [3]. Далее выполняется шаг численного интегрирования уравнений Максвелла (2) по времени, определяются новые сеточные значения электрического и магнитного поля; используется метод FDTD [4]. На следующем этапе производится линейная интерполяция сеточных значений электрического и магнитного поля для точек нахождения частиц; для получения каждого значения используются 8 ближайших сеточных значений. Интерполированные значения полей используются при интегрировании уравнений движения частиц (1); для интегрирования используется метод Boris по описанию в [1].

4. Параллельная реализация с использованием MPI

Параллельная реализация разрабатывается для использования на кластерных системах. Предлагается следующая схема работы:

1. Распределение задачи по узлам вычислительного кластера осуществляется при помощи интерфейса MPI.
2. На каждом узле кластера при помощи OpenMP выполняется распределение нагрузки между вычислительными ядрами. В настоящий момент реализован вариант, основанный на использовании MPI.

Декомпозиция задачи осуществляется по территориальному принципу: расчетная область разбивается на подобласти (домены) равного размера, операции над которыми выполняются параллельно. Вычислительный узел, на котором производятся операции над определенным доменом, хранит данные об электромагнитных полях и данные о частицах, находящихся в соответствующей части физического пространства. Данные, относящиеся к узлам, попадающим на границы между двумя или более доменами, хранятся на всех вычислительных узлах, обрабатывающих такие домены. Кроме того, вычислительный узел хранит данные о магнитных полях в центрах ячеек, граничащих с обрабатываемым им доменом. На Рис. 2 приведен пример разбиения расчетной области на домены в двумерном случае: ячейки сетки изображены прямоугольниками, увеличенная толщина линий соответствует границам доменов, заштрихована подобласть, составляющая один из доменов, пунктиром выделена область хранимых значений электрического и магнитного поля.

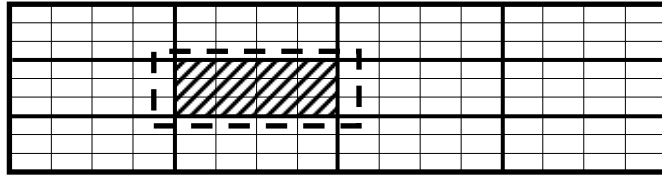


Рис. 2. Разбиение расчетной области на домены в двумерном случае

Операции параллельной обработки внутренних частей доменов выполняются полностью аналогично последовательной версии. Для поддержания актуальности данных во всех доменах используются обмены данными о токах, полях и частицах. Для краткости далее будем называть это обменом токами, полями и частицами, соответственно. Вычислительная схема параллельной версии приведена на Рис. 3.

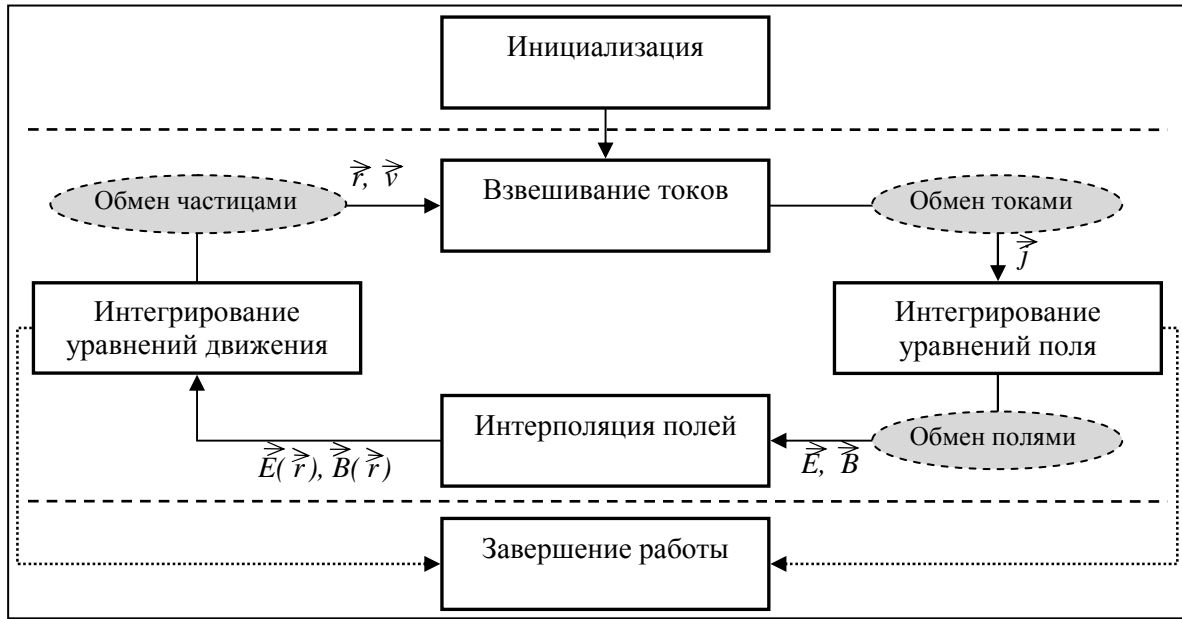


Рис. 3. Вычислительный цикл параллельной реализации метода

При обменах токами и полями каждый домен взаимодействует с 6 соседями, при обменах частицами – с 26 соседями (в случае, когда частица покидает пределы домена, она попадает в один из соседних доменов). Таким образом, все обмены данными осуществляются между вычислительными узлами, обрабатывающими соседние домены.

5. Тестовые задачи и результаты экспериментов

Для проверки правильности реализации метода частиц в ячейках традиционно используется ряд тестовых задач, для которых известно аналитическое решение:

1. Релятивистское движение заряженной частицы в постоянном электромагнитном поле (проверяется алгоритм численного решения уравнений движения (1)).
2. Распространение электромагнитной волны в вакууме (проверяется алгоритм численного интегрирования уравнений Максвелла (2)).
3. Ленгмюровские колебания плазмы (проверяются процедуры взвешивания токов, интерполяции полей и учет плотности тока в уравнениях Максвелла (2)).

Ввиду отсутствия коллективных эффектов и, следовательно, технической тривиальности проверки в настоящей работе мы не будем приводить результаты решения первой тестовой задачи, подтверждающие соответствие численных расчетов теоретическим предсказаниям.

В рамках второй тестовой задачи был смоделирован процесс распространения в вакууме гармонической электромагнитной волны с линейной поляризацией. Как известно, аналитическим решением уравнений (2) является распространение синусоидальной волны с сохранением пространственного профиля со скоростью света, что соответствует гармоническим осцилляци-

ям напряженности электрического поля в каждой точке пространства с частотой $\omega = kc$, где k – волновое число. На Рис. 4 приведено сравнение результирующей частоты осцилляций, полученной при моделировании (с использованием периодических граничных условий), с аналитическим результатом для различных значений волнового числа, минимальное значение соответствует 120 шагам пространственной сетки на длину волны, максимальное – 4 шагам на длину волны. Отличие от аналитического результата при больших значениях волнового числа является известным для метода FDTD следствием неточного описания при недостаточно малом по сравнению с характерными масштабами физического процесса пространственном шаге сетки.

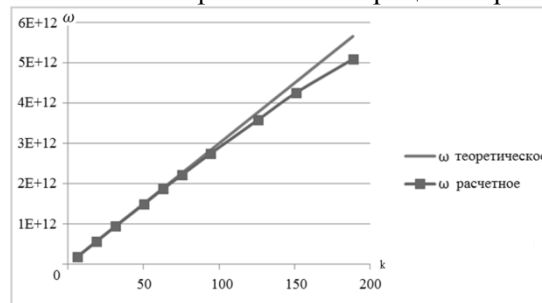


Рис. 4. Сравнение частоты осцилляций полученной при численном моделировании с аналитическим результатом для разных значений волнового числа

В рамках третьей тестовой задачи моделировались Ленгмюровские колебания двухкомпонентной плазмы, вызванные небольшим синусоидальным (в пространстве) отклонением концентрации электронов от равновесного состояния в начальный момент. Ионы при этом моделировались как неподвижные частицы. В соответствии с известным результатом физики плазмы, при малой амплитуде колебаний должны наблюдаться гармонические осцилляции концентрации электронов и напряженности электрического поля с плазменной частотой, определяемой выражением $\omega_{theoretical} = \sqrt{4\pi n_e e^2 / m_e}$, где e и m_e – заряд и масса электрона соответственно, n_e – равновесная концентрация электронов в плазме. Для сравнения результата моделирования с аналитическим решением тестовой задачи на Рис. 5. приведен спектр временной эволюции напряженности электрического поля, который имеет ярко выраженный пик, соответствующий Ленгмюровским колебаниям. Относительное отклонение частоты, соответствующей максимуму спектра, от теоретического значения составляет 2,8%, что с учетом параметров моделирования соответствует ожиданиям.

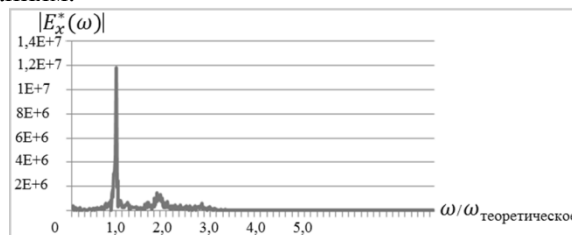


Рис. 5. Спектр временной эволюции напряженности электрического поля при моделировании Ленгмюровских колебаний холодной плазмы

Вычислительные эксперименты выполнены на кластере Нижегородского госуниверситета, включающего 64 двухпроцессорных двухъядерных сервера Intel Xeon 3.2 GHz, 4 GB RAM, сетевое оборудование на основе Gigabit Ethernet. Использовался Microsoft HPC Pack 2008 SDK, Microsoft Visual C++ 2008 SP1.

Для определений характеристик масштабируемости рассматривались две тестовые задачи (Ленгмюровские колебания плазмы) разной размерности. Параметры задач и результаты экспериментов приведены в таблицах 1 и 2. Анализ результатов позволяет сделать следующие выводы:

1. В первом тесте наблюдается существенное падение эффективности с ростом числа процессов по причине снижения вычислительной нагрузки в расчете на один процесс. К

- достижению количества процессов значения 32, время, потраченное на вычисления, становится меньше времени, потраченного на передачу данных.
- Во втором тесте наблюдается достаточно хорошая эффективность распараллеливания вплоть до использования 64-х процессов (16 двухпроцессорных двухъядерных узлов кластера).
 - Учитывая, что второй тест отличается от первого бóльшим размером сетки и количеством частиц, можно предполагать, что при решении практических задач с размерами сетки, значительно превышающими тестовые параметры, будет наблюдаться приемлемая эффективность на существенно большем числе вычислительных узлов.

Таблица 1

Тест 1: сетка 128x16x16, 983 039 частиц, 7168 итераций						
Количество процессов	1	2	4	8	16	32
Количество узлов	1	1	1	2	4	8
Вычисления, сек.	3466,70	1754,85	856,17	426,77	212,85	105,39
Передача, сек.	231,32	220,78	173,25	221,79	171,66	229,51
Итого, сек.	3698,01	1975,63	1029,42	648,56	384,51	334,90
Ускорение		1,87	3,59	5,70	9,62	11,04
Эффективность, %		93,59	89,81	71,27	60,11	34,51

Таблица 2

Тест 2: сетка 256x32x32, 7 864 319 частиц, 1024 итерации							
Количество процессов	1	2	4	8	16	32	64
Количество узлов	1	1	1	2	4	8	16
Вычисления, сек.	3902,38	1987,77	985,84	489,26	242,32	123,38	68,02
Передача, сек.	259,57	208,38	167,11	87,16	46,86	24,92	13,68
Итого, сек.	4161,94	2196,15	1152,95	576,42	289,18	148,30	81,70
Ускорение		1,90	3,61	7,22	14,39	28,06	50,94
Эффективность, %		94,76	90,25	90,25	89,95	87,70	79,59

6. Заключение

Разработана параллельная версия программного обеспечения для численного моделирования плазмы методом частиц в ячейках. Данная реализация на стандартных тестах показывает результаты, соответствующие теоретическим предсказаниям. Проведенные вычислительные эксперименты демонстрируют работоспособность параллельной версии, построенной на основе MPI и ориентированной на кластерные системы. В параллельной версии достигается эффективность ~80% при решении тестовых задач.

Целью дальнейших исследований является модификация параллельной версии с целью улучшения ее производительности и масштабируемости. Основное направление работ – создание OpenMP-реализации для распараллеливания решения задач на каждом узле кластера. Планируется переработка кода для гетерогенных систем с учетом возможностей современных графических процессоров.

Литература

- Hockney R., Eastwood J. Computer Simulation Using Particles. – IOP, Bristol and New York, 1989.
- Tskhakaya D. The Particle-in-Cell Method // Computational Many-Particle Physics. Lecture Notes in Physics, 2008, Volume 739/2008. – Berlin: Springer. – P. 161–189.
- Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование: Пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 452 с.

4. Taflove A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. – London: Artech House, 1995. – 599 P.