

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАРЛЕЙ-БУНЕМАНОВСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

Д.В. Ковалёв, А.П. Смирнов

Фарлей-бунемановская неустойчивость - это низкочастотная неустойчивость в плазме, движимая достаточно сильным квазистационарным электрическим полем, перпендикулярным магнитному полю. Эта неустойчивость возникает в слабоионизированной E-области ионосферы Земли, а также может развиваться в атмосферах других планет, на звёздах и в других разновидностях плазмы, где электроны замагничены, а ионы немагничены [1,2].

Изучение механизмов и основных характеристик развития фарлей-бунемановской неустойчивости важно, так как возмущения плотности плазмы, создаваемые неустойчивостью, влияют на распространение радиосигнала и, следовательно, приводят к помехам в радиоэфире. Во время сильных магнитосферных возмущений в полярных областях Земли возмущенное электрическое поле, создаваемое неустойчивостью, за счет аномального разогрева электронов приводит к изменению проводимости ионосферы. Корректные оценки этого эффекта важны для правильного моделирования магнитосферно-ионосферной связи и предсказаний космической погоды.

Ионосферные аномалии интенсивно исследуются с помощью запусков ракет, лабораторных экспериментов и радиопередающих комплексов, таких как Jicamaga, EISCAT, SPEAR, HAARP, Сура. Но, несмотря на полувековую историю экспериментальных и теоретических исследований нелинейных процессов в плазме атмосферы Земли, на данный момент не существует единой теории, описывающей нелинейную динамику плазмы. Усложнение новых теоретических моделей приводит к тому, что влияние различных внешних факторов на нелинейное поведение плазмы часто не может быть оценено без компьютерного моделирования.

На текущий момент в мире численное моделирование фарлей-бунемановской неустойчивости выполняется в Центре космической физики Бостонского университета США с помощью программного кода, основанного на методе частиц. Моделирование проводится на вычислительном комплексе IBM Blue Gene, установленном в Бостонском университете [2].

Численное исследование плазмы с помощью гибридной модели, состоящей из многомерного кинетического уравнения и гидродинамических уравнений, является альтернативой более традиционному методу частиц и имеет ряд преимуществ, заключающихся в меньшем количестве численных шумов в решении и возможности моделирования поведения электронов без искусственного увеличения их массы за разумное вычислительное время. Это позволяет, например, проводить моделирование с параметрами, близкими к пороговым значениям неустойчивости.

Краткое изложение модели неустойчивости.

Фарлей-бунемановская неустойчивость возникает в верхнем D- и нижнем E-слое ионосферы Земли на высотах примерно от 80 до 120 км при наличии замагниченных электронов и немагниченных ионов, что может быть записано в виде следующих условий:

$$\frac{\nu_{en}}{\Omega_e} \ll 1 \quad \frac{\nu_{in}}{\Omega_i} > 1,$$

ν_{en} и ν_{in} - это средние частоты столкновений электронов и ионов с нейтральными частицами, а $\Omega_{e,i} = eB_0/m_{e,i}$ - гирочастоты электронов и ионов во внешнем геомагнитном поле \vec{B}_0 , массы которых $m_{e,i}$ соответственно. В E-области ионосферы соотношение частот столкновений ионов и электронов с нейтральными частицами близко к постоянному и равно $\nu_{en} \approx 10 \nu_{in}$, а масса ионов приблизительно равна тридцати протонным массам.

В E-области ионосферы выполнено условие $\omega \ll \nu_{in}$, где ω - преобладающая волновая частота в турбулентной плазме, поэтому можно пренебречь инерцией электронов. Низкочастотные процессы в плазме из-за незначительных изменений магнитного поля имеют электростатическую природу, которая позволяет описывать турбулентное электрическое поле с помощью электростатического потенциал ϕ . При таких предположениях, используя гидродинамическую теорию, можно получить такое уравнение:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial g_{\parallel}}{\partial z} + \nabla_{\perp} \cdot \vec{g}_{\perp} = 0,$$

где электронные потоки заданы следующим образом

$$g_{\parallel} = n_e V_{e\parallel} = - \frac{1}{m_e \tilde{\nu}_{en}} \left(\nabla_{\parallel} (n_e T_e) - n_e e \nabla_{\parallel} \phi \right),$$

$$g_{\perp} = n_e \vec{V}_{e\perp} = - \frac{\tilde{v}_{en}}{m_e \Omega_e^2} (\nabla_{\perp} (n_e T_e) - n_e e (\nabla_{\perp} \phi - \vec{E}_0)) + n_e \vec{V}_0 + \frac{n_e e}{m_i \Omega_i} \vec{e}_z \times \nabla_{\perp} \phi,$$

где n_e - плотность электронов, V_e - это среднемассовая скорость электронов, $\tilde{v}_{en} = v_{en} \sqrt{T_e/T_i}$ - зависимость частоты столкновений от температуры, T_e - температура электронов, T_i - температура ионов (она же температура электронов в начале моделирования), \vec{E}_0 - постоянное электрическое поле, перпендикулярное геомагнитному полю \vec{B}_0 , $\vec{e}_z = \vec{B}_0/B_0$ - единичный вектор вдоль магнитного поля, $\vec{V}_0 = c \vec{E}_0 \times \vec{e}_z / B_0$ - дрейфовая скорость, $\nabla_{\perp} = \vec{e}_x \partial / \partial x + \vec{e}_y \partial / \partial y$ - оператор по координатам, перпендикулярным \vec{B}_0 , x, y, z - координаты вдоль \vec{V}_0 , \vec{E}_0 , \vec{B}_0 соответственно.

Изменение температуры электронов описывается следующим нелинейным диффузионно-конвекционным уравнением:

$$n_e^{2/3} \frac{d}{dt} \frac{T_e}{n_e^{2/3}} = \frac{2}{3} \mu_e \tilde{v}_{en} V_e^2 - \delta_e \tilde{v}_{en} (T_e - T_i),$$

где d/dt - полная лагранжева производная по времени, $\mu_e = m_e m_n / (m_e + m_n) \approx m_e$ - приведенная масса, параметр δ_e отвечает за относительное количество энергии, потерянной при одном неупругом соударении (величина δ_e на два порядка больше соответствующей величины для упругого соударения $2 m_e / m_n$), m_n - средняя масса нейтральной частицы (в E-области примерно равна ионной массе). Выражение, стоящее в левой части температурного уравнения, описывает бесстолкновительное адиабатическое изменение температуры электронов и тепловую адвекцию. Первый член в правой части описывает столкновительный нагрев, а второй - охлаждение при электрон-нейтральных соударениях.

Кинетическое уравнение для ионов с учетом немагнитности ионов и важного эффекта затухания Ландау может быть записано с помощью столкновительного члена вида БГК (Bhatnagar—Gross—Krook):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) f + \frac{e(\vec{E}_0 - \nabla \phi)}{m_i} \partial f \partial \vec{V} = -\nu_{in} (f - f_0),$$

здесь \vec{V} - это скорость ионов, $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ - функция распределения ионов, $n_i(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 v$. Невозмущенная функция распределения ионов f_0 является максвелловской.

При решении кинетического уравнения учитывается, что проводимость немагнитных ионов изотропна, поэтому их отклик пропорционален электрическому полю. Электрическое поле, возникающее из-за разности зарядов, вдоль направления \vec{B}_0 мало из-за малой продольной составляющей колебаний фарлей-бунемановской неустойчивости, что приводит к малой поправке в средней скорости ионов. Поэтому движением ионов вдоль направления \vec{B}_0 можно пренебречь.

Уравнение Пуассона для электрического потенциала записывается следующим образом:

$$\varepsilon_0 \Delta \phi = e(n_e - n_i).$$

Моделирование фарлей-бунемановской неустойчивости проводится в области, представляющей собой прямоугольный параллелепипед. На границах области вдоль каждого направления устанавливаются периодические граничные условия. В пространстве скоростей при решении кинетического уравнения для ионной функции распределения выбирается область $[-V_{max}, V_{max}]$, где V_{max} подбирается эмпирически.

Методы решения задачи.

Основная проблема при решении уравнений движения электронов заключается в том, что при моделировании неустойчивости необходимо, во-первых, проводить моделирование как можно в большей области, во-вторых, как можно лучше аппроксимировать плотности и температуру, то есть увеличивать количество точек на характеристическую единицу длины (равную отношению V_{Ti}/v_{in} , где V_{Ti} - тепловая скорость ионов)[3]. Из физических соображений для разрешения дебаевского радиуса на единицу характеристической длины должно приходиться как минимум 5-10 точек, в то время как для моделирования процесса в целом в плоскости (x, y) желательно рассматривать область длиной по каждому направлению как минимум в 20 характеристических длин. Многие испробованные разностные схемы для конвекции (Лакс-Вендрофф, Лакс-Фридрихс, Мак-Кормак, различные комбинации этих методов и некоторые другие схемы) не дают достаточной аппроксимации на сетках с большим шагом по пространству, когда на единицу длины приходится 5-10 точек, и оказываются неустойчивыми при больших значениях скоростей переноса. Для проведения расчетов и соблюдения условий развития устойчивости приходится сильно уменьшать шаг по времени, что приводит к увеличению времени выполнения алгоритма.

Для того, чтобы избежать этой проблемы и уменьшить вычислительное время в уравнения для электронной плотности и температуры подставляются потоковые части, и явно выделяются конвекционные и

диффузионные члены. Для решения полученных уравнений (для температуры или плотности электронов) применяется метод расщепления по физическим процессам, то есть уравнения разделяются на диффузионную и конвекционную части, которые решаются последовательно, используя в качестве начального условия решение предыдущего уравнения. Для решения обеих подзадач используются разностные схемы второго порядка точности по пространственной сетке. Суммарная аппроксимация имеет второй порядок точности по пространственной сетке и первый порядок точности по времени. Построение схемы второго порядка точности по времени крайне сложно в силу нелинейной зависимости электронной плотности от ионной плотности, электрического потенциала и электронной температуры.

Для численного нахождения решения электронного уравнения на одном шаге по времени используется следующий алгоритм: сначала решается диффузионная часть с начальными условиями, взятыми с предыдущего шага по времени, а затем это решение используется в качестве начального условия при решении конвекционной части. Диффузионную часть нелинейного уравнения предлагается решать с помощью явных/неявных методов, а конвекционную часть - с численного интегрирования по характеристикам на основе интерполяции по Лагранжу по пяти точкам вдоль каждого из направлений.

Численный алгоритм решения кинетического уравнения основан на методе расщепления, который заключается в том, что основное уравнение расщепляется на два более простых уравнения, например, следующим образом:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{e}{m_i} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial v_x} + \frac{e}{m_i} \left(E_0 - \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) \frac{\partial f}{\partial v_y} = -v_{in} (f - f_0).$$

Решение на одном шаге по времени находится так: сначала решается перенос в пространстве координат с использованием значений функции распределения с предыдущего шага по времени, затем полученное решение подставляется в качестве начального значения для решения переноса в пространстве скоростей. Оба из расщепленных уравнений представляют собой набор из двумерных уравнений переноса, причем с постоянными скоростями, поэтому можно использовать быстрые и эффективные методы для нахождения решения. В данной работе используется интегрирование по характеристикам.

Решение уравнения Пуассона находится с помощью спектрального разложения с использованием быстрого дискретного преобразования Фурье.

Схематический алгоритм решения уравнений, описывающих неустойчивость, на одном шаге по времени:

1. Считая известными плотности электронов и ионов, решить уравнение Пуассона.
2. Решить ионное уравнение.
3. Последовательно решить N раз уравнение для электронов совместно с уравнением Пуассона, используя в N раз меньший по сравнению с ионный шаг по времени.

Необходимость более частого вычисления решения электронного уравнения связана с тем, что скорость электронов на порядок больше скорости ионов. И так как ионное уравнение наиболее вычислительно сложно, то его следует решать как можно меньшее количество раз, с максимально возможным шагом по времени. Условие Куранта для электронов из-за большей скорости более жесткое, чем для ионов, поэтому приходится производить $N \approx 40 - 90$ (в зависимости от параметров) расчетов с меньшим шагом по времени для того, чтобы сохранить устойчивость разностных схем. Уравнение Пуассона пересчитывается, так как при движении электронов меняется электрическое поле.

Методы распараллеливания алгоритмов.

Для удобства дальнейшего изложения введем следующие обозначения: N_x, N_y, N_z - количество точек дискретной сетки, описывающей область моделирования, вдоль направлений Ox, Oy, Oz соответственно. Точки сетки имеют нумерацию от 0 до $N_w - 1$, $w = x, y, z$ вдоль каждого направления, каждая точка однозначно идентифицируется своими номерами (i, j, k) вдоль направлений Ox, Oy, Oz . Обозначим M - количество используемых вычислительных узлов кластера.

Рассмотрим отдельно случаи $M \leq N_z$ и $M > N_z$, предполагая, что $N_z \geq N_y \approx N_x$. В обоих случаях также будем предполагать сбалансированность нагрузки, то есть на каждый узел вычислительного комплекса распределяется одинаковый объем вычислений. Для этого в первом случае N_z должно нацело делиться на M , во втором случае M должно нацело делиться на N_z и $N_z \cdot N_x$. Изложенные алгоритмы могут быть легко расширены и на несбалансированный случай. Однако, в этом случае часть узлов вычислительного комплекса будет выполнять меньшую долю расчетов, чем остальные, что снизит общую производительность системы и увеличит время вычислений. Будем считать, что пользователь заинтересован в повышении эффективности расчетов и, выбирая M, N_x, N_y, N_z , старается оптимальным образом распределить данные между вычислительными узлами.

В первом случае $M < N_z$ распараллеливание алгоритмов для всех уравнений базируется на общем принципе и выполняется с помощью использования технологии MPI. Массив данных разбивается вдоль выделенного направления (в нашем случае вдоль Oz) на M блоков, содержащих равное количество точек сетки. В каждый k ($k \in [0, M-1]$) блок, который размещается на k узле вычислительного комплекса, входят точки сетки, для которых номер точки вдоль выбранного направления (допустим, Oz) лежит внутри сегмента $[k(N_z-1)/M, (k+1)(N_z-1)/M]$.

Внутри каждого блока для фиксированных номеров точек вдоль направления Oz , находятся все точки вдоль направлений Ox, Oy, OV_x, OV_y , то есть на каждом вычислительном узле можно независимо проводить расчеты по разностным схемам вдоль указанных направлений. Если узел состоит из нескольких ядер или процессоров, то для распределения вычислений внутри узла дополнительно используется технология OpenMP.

При расчетах вдоль направления Oz в общем случае необходимо проводить обмен данными между вычислительными узлами. Однако, в силу постановки задачи, для решения кинетического уравнения обмен между узлами не требуется.

Во втором случае $M > N_z$ на группу узлов (в количестве $M > N_z$ штук) сначала выделяется область в пространстве Ox, Oy, OV_x, OV_y , соответствующая фиксированной точке на оси Oz . Далее, аналогично тому, как это делалось в случае $M \leq N_z$, проводится разбиение вдоль оси Ox по M/N_z узлам для каждой фиксированной точки на оси Oz . В итоге на каждый вычислительный узел распределяется блок данных, соответствующий некоторой фиксированной точке вдоль оси Oz , некоторому набору точек вдоль оси Ox и всем точкам вдоль направлений Oy, OV_x, OV_y . При таком распределении на каждом вычислительном узле независимо могут проводиться расчеты вдоль направлений Oy, OV_x, OV_y . При расчетах вдоль направления Ox необходимо проводить обмен данными внутри каждой группы из M/N_z узлов.

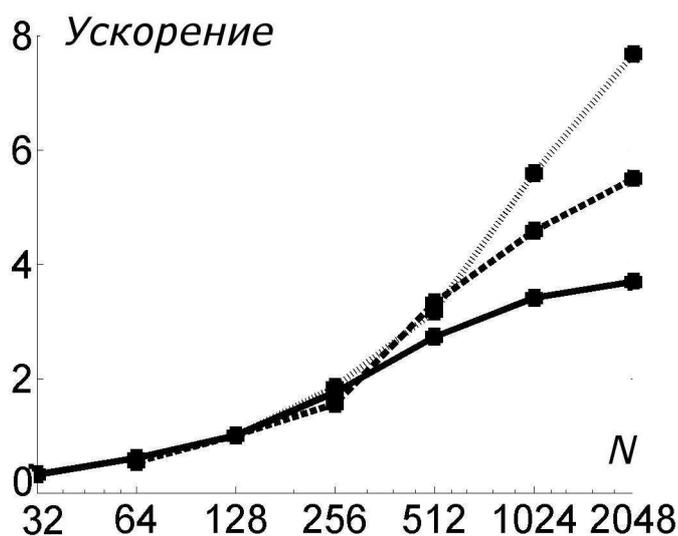
С учетом периодических граничных условий топология каждой группы из M/N_z узлов вычислительных узлов образует кольцо. То есть, у каждого узла есть два соседа справа и слева, каждый узел однозначно идентифицируется по своим соседям. Узлом слева (справа) для i узла называется узел, на котором хранятся точки сетки с номерами по оси, вдоль которой проводилось разбиение, меньшими (большими), чем на самом узле i . Соседними называются узлы, содержащие смежные блоки данных. Условие периодичности задаёт соседей для граничных узлов, так для крайнего правого узла в группе соседом справа самый левый сосед в этой же группе.

Результаты.

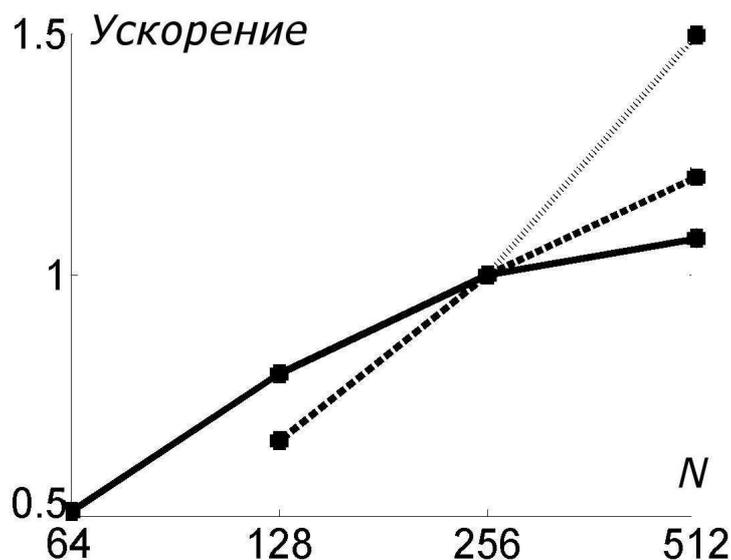
Для проверки качества распараллеливания алгоритмов был выбран ряд модельных задач, с параметрами близкими к используемым в реальных расчетах. Задача тестировалась на вычислительных комплексах IBM Blue Gene/P и СКИФ МГУ «Чебышёв».

На IBM Blue Gene/P тесты были устроены следующим образом. Во всех случаях использовалась задача с 256 точками вдоль координат x, y и 30 — вдоль V_x, V_y . На рисунке 1 показаны полученные ускорения для тестовых задач с 128 точками (сплошная линия), 256 точками (пунктирная линия), 512 точками (линия из точек) вдоль координаты z . Ускорение рассчитывалось относительно запуска на 128 узлах. Во всех тестах задача запускалась в гибридном MPI-OpenMP режиме с 4 нитями на каждом вычислительном узле.

На СКИФ МГУ «Чебышёв» задача тестировалась в MPI режиме. В силу ограничений на оперативную память по сравнению с тестами для IBM в каждой задаче было уменьшено количество точек в скоростном пространстве с 30 до 15, также из-за нехватки памяти часть расчетов на малом числе узлов не была произведена. Результаты вычислений представлены на рисунке 2. Ускорения рассчитывались относительно 256 узлов.



Можно отметить, что при расчетах на обоих вычислительных комплексах удалось добиться эффективного распараллеливания задачи. Разработанные алгоритмы эффективно выполняются на большом числе узлов.



Работа выполнена в рамках программы СКИФ–ГРИД Союзного Государства России и Белоруссии и при поддержке государственных контрактов № П-958 от 20 августа 2009 года и № 02.740.11.0196 по Федеральной целевой программе «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» и Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 08-01-00721).

ЛИТЕРАТУРА:

1. D.V. Kovalev, A.P. Smirnov, Y.S. Dimant Modeling of the Farley-Buneman instability in the E-region ionosphere: a new hybrid approach // *Annales Geophysicae* – 2008 – Vol.26. - N9. - Pp. 2853-2870.
2. M.M. Oppenheim, Y.S. Dimant, L.P. Dyrud Large-scale simulations of 2-D fully kinetic Farley-Buneman turbulence // *Annales Geophysicae* – 2008 – Vol.26. - N3. - Pp. 543-553.
3. Д.В. Ковалёв Моделирование фарлей-бунемановской неустойчивости с использованием четырехмерного кинетического уравнения // *Математическое моделирование* - 2008. - Т.20. - №12. - С. 89-104.