

ОПТИМИЗАЦИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА СУПЕРЭВМ АНОМАЛЬНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В ПЛАЗМЕ МЕТОДОМ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ

В.А. Вшивков, А.В. Снытников

Аннотация.

Проводится моделирование взаимодействия плазмы с релятивистским электронным пучком в трехмерной постановке. Модель построена на основе метода частиц в ячейках. Основную часть времени вычислений при этом занимает расчет движения частиц. В связи с этим проводится оптимизация вычислений, направленная на повышение эффективности использования кэш-памяти. А именно, выполняется частичное упорядочивание модельных частиц по положению в пространстве и все компоненты электрического и магнитного поля хранятся в одном 4-мерном массиве. Использование этих методик позволяет сократить время расчета движения частиц в 2 раза. Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, гранты 08-01-615 и 08-01-622, а также интеграционных проектов СО РАН № 103, № 113 и № 26.

Часть I.

Раздел I.1. Актуальность работы.

Под аномальной теплопроводностью подразумевается наблюдаемое на многопробочной магнитной ловушке ГОЛ-3 (ИЯФ СО РАН) понижение электронной теплопроводности на 2-3 порядка по сравнению с классическим значением [1]. Необходимость применения суперкомпьютерных вычислений обусловлена тем, что требуется, во-первых, иметь достаточно подробную сетку для того, чтобы воспроизвести резонансное взаимодействие релятивистского электронного пучка с плазмой, и, во-вторых, большое количество модельных частиц для того, чтобы промоделировать возникающую в дальнейшем турбулентность.

При моделировании плазмы методом частиц в ячейках для вычисления новых значений координаты и импульса модельной частицы используются значения электрического и магнитного поля. Каждая компонента поля хранится в отдельном трехмерном массиве. Таким образом на каждом временном шаге для каждой модельной частицы происходит обращение к шести трехмерным массивам. Модельные частицы расположены внутри расчетной области случайным образом. Если даже модельные частицы расположены рядом в массиве, где хранятся их координаты, то сами значения координат будут близкими только вначале. В дальнейшем модельные частицы перемешиваются. Это означает, что обращения к трехмерным массивам, содержащим электрическое и магнитное поля, являются неупорядоченными, и использование кэш-памяти в данном случае не позволяет сократить время счета.

Раздел I.2. Метод частиц для моделирования неравновесной плазмы.

Плазма в экспериментах на ГОЛ-3 является существенно неравновесной, что делает невозможным применение численных методов гидродинамического типа для моделирования этой плазмы. Поэтому для решения задачи об аномальной теплопроводности используется метод частиц в ячейках.

Метод частиц в ячейках получил широкое распространение для моделирования нестационарных задач физики разреженной плазмы в настоящее время в связи с бурным развитием вычислительной техники, в том числе появлением многопроцессорных комплексов. Его распространению способствует и то, что он является фактически единственным методом для моделирования вышеупомянутых задач [4]. Но при решении задач с большим числом частиц и в течение большого времени стали проявляться недостатки метода, которые раньше нельзя было заметить. Эти недостатки связаны с проявлением счетных шумов.

В методе частиц каждая частица становится носителем некоторого набора характеристик среды, таких как заряд, масса, импульс, кинетическая энергия и т.д. Для того, чтобы аналогичным образом связать с каждой модельной частицей определенную температуру, необходимо сделать некоторое предположение относительно вида функции распределения в этой точке пространства (например, как это делается в методе SPH). Другой вариант — вычисление температуры по ансамблю частиц, но при этом возникает проблема отделения температуры от нефизических эффектов (шумов), возникающих в методе частиц. Основным источником нефизических шумов в методе частиц-в-ячейках — наличие сетки, на которой вычисляются распределения плотности, скорости, тока.

На сегодняшний день нет единого подхода к решению проблемы нефизических шумов, нет даже общепринятого количественного определения, что такое нефизический шум в методе частиц. Для уменьшения уровня нефизических шумов чаще всего либо увеличивают количество частиц, что не всегда возможно в силу ограниченности ресурсов ЭВМ, либо модифицируют форму частицы. Трудность заключается в том, что при этом меняется и значение модельной температуры.

Раздел I.3. Описание модели.

Численная модель, используемая для решения задачи о релаксации пучка, состоит из уравнений Власова для электронной и ионной компонент плазмы и системы уравнений Максвелла. В данной работе используется алгоритм решения этих уравнений, описанный в работе [3]. Уравнения Власова решаются методом частиц в ячейках (PIC). В рамках этого метода решаются уравнения движения модельных частиц, которые являются уравнениями характеристик для уравнения Власова. Для решения уравнений движения используется схема с перешагиванием. Для нахождения электрических и магнитных полей используется схема, в которой поля определяются из разностных аналогов законов Фарадея и Ампера. Эта схема имеет второй порядок аппроксимации по пространству и по времени.

Рассмотрим следующую постановку задачи. В начальный момент в трехмерной области решения, которая имеет форму прямоугольного параллелепипеда находится плазма, состоящая из электронов и ионов. Модельные частицы распределены по области равномерно. задается плотность плазмы и температура электронов, температура ионов считается нулевой. Дополнительно в области присутствуют электроны пучка, которые также распределены по области равномерно (предполагается, что пучок уже вошел в расчетную область). Электроны пучка отличаются от электронов плазмы тем, что они имеют кинетическую энергию направленного движения 1 МэВ, а их температура равна нулю. Модельные частицы, соответствующие электронам пучка, имеют меньшую массу, нежели модельные частицы, соответствующие электронам плазмы (отношение их масс равно отношению плотности плазмы и плотности пучка).

Итак, исходными параметрами задачи являются: плотность и температура электронов плазмы, отношение плотности электронов плазмы к плотности электронов пучка, энергия электронов пучка.

Раздел I.4. Параллельная реализация

Распараллеливание выполнено методом декомпозиции расчетной области по направлению, перпендикулярному направлению движения электронного пучка. Используется смешанная эйлерово-лагранжева декомпозиция. Сетка, на которой решаются уравнения Максвелла, разделена на одинаковые подобласти по одной из координат. С каждой подобластью связана группа процессоров (в том случае, когда вычисления производятся на многоядерных процессорах, процессором для единообразия будет именоваться отдельное ядро). Далее, модельные частицы каждой из подобластей разделяются между процессорами связанной с этой подобластью группы равномерно, вне зависимости от координаты.

Каждый из процессоров группы решает уравнения Максвелла во всей подобласти. Далее решаются уравнения движения модельных частиц. После этого происходит суммирование значений тока по всей подобласти. Один из процессоров группы производит обмен граничными значениями тока и полей с соседними подобластями, и затем рассылает полученные граничные значения всем процессорам своей группы. В случае, если и уравнения Максвелла для подобласти, и уравнения движения всех частиц подобласти решаются на одном процессоре, вычисления с частицами занимают в 10-20 раз больше времени.

Важно отметить, что использование суперкомпьютеров в данной задаче привело не просто к улучшению формальных показателей точности и скорости вычислений. Удалось добиться качественного улучшения понимания физической ситуации: благодаря расчету на суперкомпьютере НКС-30Т получена модуляция плотности электронов плазмы под влиянием релаксации релятивистского электронного пучка. Предполагается, что именно рассеяние электронов в областях повышенной плотности плазмы является причиной аномального понижения теплопроводности. А расчет на МВС-100000 позволил пронаблюдать в вычислительном эксперименте возникновение физической неустойчивости в плазме в результате резонансного взаимодействия с пучком.

Часть II. Оптимизация.

Раздел II.1. Упорядочивание модельных частиц.

Модельные частицы расположены внутри расчетной области случайным образом. Если даже модельные частицы расположены рядом в массиве, где хранятся их координаты, то сами значения координат будут близкими только вначале. В дальнейшем модельные частицы перемешиваются. Это означает, что обращения к трехмерным массивам, содержащим электрическое и магнитное поля, являются неупорядоченными, и использование кэш-памяти в данном случае не позволяет сократить время счета.

Использование кэш-памяти было бы более эффективным, если бы частицы были упорядочены. Тогда значения полей, загруженных в кэш при расчете движения некоторой частицы, могли бы быть использованы и для следующей частицы, если она расположена близко. Для этого достаточно упорядочить частицы по ячейкам сетки, то есть, хранить каким-то образом вместе все частицы, которые расположены внутри каждой ячейки. Это означает, что полная сортировка массива частиц не нужна, так как с точки зрения использования кэш-памяти не имеет значения, как частицы расположены внутри ячейки.

Модельные частицы, принадлежащие некоторой ячейке сетки, можно хранить в виде связанного списка или в виде массива. Преимущества списка очевидны: нет ограничения на число частиц в ячейке, простота добавления/удаления, но есть и недостатки, а именно большее по сравнению с массивом время доступа. Если же частицы каждой ячейки хранятся в виде массива (статического массива), то применительно к трехмерной

задаче для двух сортов частиц это даст 5-мерный массив для одной только координаты X всех частиц (напомним, что модельная частица в данном случае характеризуется шестью признаками).

Но основная проблема в случае статического массива - это максимальное число частиц в ячейке. Это означает, что заранее неизвестно, какой длины массив потребуется для хранения всех частиц в каждой ячейке. Из проведенных расчетов известно, что максимальное значение плотности электронов было равно 5 (в единицах начальной плотности). Таким образом, можно было бы задать длину массива частиц в каждой ячейке $5N$, где N - число частиц в ячейке в начальный момент времени. Но в этом случае размер массива частиц увеличится в 5 раз, а его размер составляет 70 Гб, например, для сетки $512 \times 64 \times 64$ и $N = 150$.

Использование для этой цели динамических массивов решает проблему перерасхода памяти, но создает другую: необходимость иметь внутри программы свой эффективный менеджер динамической памяти, что, возможно, является решаемой задачей, но едва ли приведет к существенному уменьшению времени работы программы в целом.

Поэтому был реализован компромиссный вариант: для каждого сорта частиц (в данном случае 2 сорта: электроны и ионы) в каждой ячейке в целочисленном массиве длины $5N$ хранить номера частиц, находящихся в данный момент в данной ячейке. Номер задает позицию частицы в больших (порядка 100 млн. элементов) вещественных массивах, в которых хранятся координаты и импульсы модельных частиц. Таким образом, при перемещении частицы из одной ячейки в другую (обязательно в соседнюю - это определяется соображениями устойчивости метода частиц) перемещается только номер частицы: он удаляется из массива номеров, описывающих текущую ячейку, и добавляется в массив номеров одной из соседних ячеек. Внутри самих массивов координат и импульсов частицы никогда не перемещаются.

Также был реализован вариант с хранением частиц каждой ячейки в виде связанного списка. В этом случае имеется 4-мерный массив указателей, задающий первый элемент списка в каждой ячейке, и отсутствуют большие массивы: вся информация по частицам хранится только в списках.

В обоих вариантах на вход процедуры интегрирования уравнений движения модельных частиц подаются шесть небольших (размером не более $5N$) массивов, хранящих координаты и импульсы частиц для каждой конкретной ячейки. Эти массивы формируются либо на основе списка частиц, либо на основе массива номеров частиц этой ячейки.

Была протестирована эффективность каждого из этих вариантов на разных архитектурах.

Раздел II.2. Оптимальная организация массивов электрического и магнитного поля.

Поле в каждом узле сетки описывается шестью значениями: три компоненты электрического поля и три компоненты магнитного. В конкретной точке внутри ячейки поле вычисляется линейной интерполяцией по всем восьми узлам сетки, образующим ячейку. Каждая из шести компонент поля хранится в трехмерном массиве, и этот массив не может быть помещен в кэш целиком, а в интерполяционном выражении (в вычислении поля в конкретной точке) участвуют восемь различных элементов массива, это приводит к тому, что интерполяция вычисляется достаточно долго. В среднем вычисление всех шести компонент поля в точке, в которой находится частица, составляет 40 % всего времени расчета движения отдельной частицы. Все остальные действия с отдельной частицей: вычисление силы, вычисление новых координат, скоростей и импульсов, определение перехода из одной ячейки в другую каждый в отдельности составляют не более 20 % времени.

Таким образом вычисление поля в точке нахождения модельной частицы является наиболее затратным этапом вычислений с частицами, и оптимизацию вычислений с частицами следует начинать именно с этого этапа. Для повышения эффективности использования кэш-памяти был предложен следующий вариант: все компоненты поля хранятся в одном 4-мерном массиве, в котором первый индекс задает компоненту поля (1 - X-компонента электрического поля, 2 - Y-компонента электрического поля, ...6 - Z-компонента магнитного поля), а три следующих индекса задают ячейку сетки. В силу того, что в Фортране элементы массива хранятся подряд именно по первому индексу массива, то при загрузке в кэш, например, X-компоненты поля в некотором узле, будут загружены и все остальные компоненты поля в этом узле. Таким образом, вероятно, что вычисление поля в точке нахождения модельной частицы пройдет значительно быстрее, чем в том случае, когда все компоненты поля хранятся в отдельных трехмерных массивах. Проведенные тесты подтверждают это.

Далее рассмотрим результаты тестов, показывающих эффективность выполненной оптимизации. Тестовые расчеты проводились на рабочей станции с процессором AMD Phenom, и на кластере Новосибирского Государственного Университета, оснащенного процессорами Intel Nehalem. В обоих случаях была выбрана сетка такого размера, что даже один трехмерный массив, содержащий, например, одну из компонент поля, заведомо не помещается в кэш.

Размер сетки: (рабочая станция, процессор Phenom, последовательный счет) $64 \times 32 \times 32$ узла, 50 частиц в ячейке, (кластер, процессор Nehalem, в пересчете на один процессор), $512 \times 2 \times 64$ узла, 50 частиц в ячейке.

Время счета движения частиц, один временной шаг (рабочая станция, процессор Phenom):

1. Исходный неоптимизированный вариант: 13.25 сек.
2. Хранение значений поля в 4-мерном массиве: 8.8 сек.
3. Упорядочивание частиц с помощью массивов номеров: 12.51 сек.
4. Упорядочивание частиц с помощью связанного списка: 10.5 сек.

5. Сочетание вариантов 2 и 3: 10.92 сек.

Время счета движения частиц, один временной шаг (кластер, процессор Nehalem):

1. Исходный неоптимизированный вариант: 7.22 сек.
2. Хранение значений поля в 4-мерном массиве: 6.72 сек.
3. Упорядочивание частиц с помощью массивов номеров: 5.67 сек.
4. Упорядочивание частиц с помощью связанного списка: 10.3 сек.
5. Сочетание вариантов 2 и 3: 3.67 сек.

Отсюда можно сделать вывод, что сочетание упорядочивания модельных частиц и хранения значений поля в одном 4-мерном массиве приводит к значительному сокращению времени вычислений с частицами, в данном случае, почти в 2 раза. Хранение частиц в виде связанных списков оказалось неэффективным для процессора Nehalem, но, возможно, окажется полезным на других архитектурах (так позволяют думать измерения времени на процессоре Phenom) или в тех случаях, когда установить максимальное число частиц в ячейке невозможно.

Часть III. Аномальная теплопроводность в вычислительных экспериментах.

Во многих случаях поведение коэффициента теплопроводности плазмы носит аномальный характер. Данное явление требует для своей интерпретации трехмерного численного моделирования, поскольку оно носит нестационарный нелинейный характер и аналитические методы в данном случае неприменимы.

Для вычислительных экспериментов по моделированию взаимодействия плазмы с пучком были заданы следующие начальные условия: температура электронов $T_e = 1$ кэВ, температура ионов $T_i = 0$, плотность плазмы $n = 10^{17}$ см⁻³, отношение плотностей электронов пучка и электронов плазмы равна 0.001, энергия пучка равна 1 МэВ. Размер сетки 512x64x64, 150 модельных частиц в ячейке.

Тестирование созданной модели проведено с помощью проверки выполнения законов сохранения энергии и импульса и проверки сходимости результатов при уменьшении шага сетки и увеличении числа модельных частиц. Кроме того, исследована динамика обмена энергией между ионной и электронной компонентами плазмы в отсутствие пучка. Также показано, что теплопроводность модельной плазмы в отсутствие пучка пропорциональна температуре в степени 2.5, что соответствует классической зависимости.

В результате численного моделирования была получена модуляция плотности плазмы с амплитудой равной 3 (относительно начальной плотности плазмы). Обнаружено рассеивание пучка, связанное с развитием неустойчивости, которая сопровождается формированием областей с пониженным коэффициентом теплопроводности. Вследствие релаксации пучка перенос тепла электронами плазмы также значительно уменьшается, и, соответственно, уменьшается коэффициент электронной плазменной теплопроводности.

Коэффициенты переноса в исследуемом процессе носят аномальный характер, и по сравнению с классическими коэффициентами оказываются на 2 порядка меньше. При этом частота столкновений для электронов равна инкременту неустойчивости, возникающей в модельной плазме.

Проведено измерение излучения плазмы в рамках созданной численной модели. Обнаружено появление излучения на двойной плазменной частоте, что соответствует экспериментальным результатам.

Заключение.

Описана параллельная реализация модели взаимодействия электронного пучка с плазмой описаны некоторые варианты оптимизации расчета движения частиц, показано, что для расчета на кластере с процессорами Intel Nehalem достигается ускорение в 2 раза по сравнению с неоптимизированным вариантом. Указано, что наиболее важной является возможность исследования с помощью суперЭВМ резонансного возбуждения плазменных колебаний в ходе релаксации пучка. Также указаны полученные в расчетах физические результаты, важнейшим из которых является обнаружение излучения на двойной плазменной частоте.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Астрелин В.Т., Бурдаков А.В., Поступаев В.В. "Подавление теплопроводности и генерация ионно-звуковых волн при нагреве плазмы электронным пучком" //Физика плазмы, 1998, том 24, № 5, с.450-462
2. Кролл Н., Трайвелпис А. "Основы физики плазмы", М: "Мир", 1975.
3. Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А. "Численные методы "частицы-в-ячейках".// - Новосибирск: "Наука", 2000.
4. Ч. Бедсел, Б.Лэнгдон "Физика плазмы и математическое моделирование", М:"Мир", 1989.