



В.А. Вшивков, Л.В. Вшивкова,
М.А. Боронина

**Распараллеливание алгоритмов для
решения задач физики плазмы на
основе гибридных моделей**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки

Вшивков В.А., Вшивкова Л.В., Боронина М.А. Распараллеливание алгоритмов для решения задач физики плазмы на основе гибридных моделей // Научный сервис в сети Интернет: труды XXI Всероссийской научной конференции (23-28 сентября 2019 г., г. Новороссийск). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2019. — С. 222-229. — URL: <http://keldysh.ru/abrau/2019/theses/13.pdf> doi:[10.20948/abrau-2019-13](https://doi.org/10.20948/abrau-2019-13)

Размещена также [презентация к докладу](#)

Распараллеливание алгоритмов для решения задач физики плазмы на основе гибридных моделей

В.А. Вшивков, Л.В. Вшивкова, М.А. Боронина

*Институт вычислительной математики и математической геофизики
СО РАН, г. Новосибирск*

Аннотация. Как известно, наиболее полное описание многих процессов в задачах физики плазмы возможно на основе кинетического уравнения Власова и системы уравнений Максвелла. Однако трудности численной реализации таких моделей затрудняют их использование при проведении расчетов даже на современных вычислительных системах. Это связано с большой разницей в пространственных и временных масштабах для электронов и ионов.

Для уменьшения вычислительных затрат при моделировании рассматриваются гибридные модели. В данных моделях ионы описываются кинетическим уравнением Власова, а электроны – уравнениями магнитной гидродинамики. Решение МГД-уравнений требует меньших вычислительных затрат, поэтому создание этих моделей очень перспективно. Рассмотрена гибридная численная модель на основе метода частиц в ячейках для моделирования взаимодействия потоков плазмы. Проведены распараллеливание алгоритма и тестовые расчёты.

Ключевые слова: Разреженная плазма, метод частиц в ячейках, параллельный алгоритм, кинетическое уравнение Власова, магнитная гидродинамика (МГД).

Parallelization of algorithms to solve the plasma physics problems using the hybrid models

V.A. Vshivkov, L.V. Vshivkova, M.A. Boronina

*The Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics
SB RAS, Novosibirsk*

Abstract. As it is known, the full description of many processes in the plasma physics problems is based on the Vlasov kinetic equation and the Maxwell system of equations. However, the difficulties of the numerical implementation of such models make difficulties for using them when carrying out computations even on modern computational systems. It deals with the large difference in space and time scales for electrons and ions.

In order to reduce the cost during the numerical modelling the hybrid models are used. In these models ions are described by the Vlasov kinetic equation when electrons are via the equations of the magnetohydrodynamics (MHD). The solving of the MHD equations requires lesser computational costs, then the development of such models is very important. A hybrid numerical model based on the particle-in-cell (PIC) method for model plasma flow interactions is considered. There have been carried out the algorithm parallelization and computational tests.

Key words: sparse plasma, particle-in-cell (PIC) method, parallel algorithm, the Vlasov kinetic equation, magnetic hydrodynamics (MHD).

Известно, что для моделирования разреженной плазмы лучше всего подходит математическая модель, состоящая из уравнений Власова для каждой компоненты плазмы (электроны и ионы разных элементов) и уравнений Максвелла для электромагнитных полей. Описывать компоненты плазмы с помощью кинетических уравнений необходимо в связи с тем, что в разреженной плазме функции распределения неравновесны, и гидродинамическое приближение неприменимо. Для численного решения задач с использованием кинетической модели наиболее эффективен метод частиц в ячейках в связи с его универсальностью для широкого диапазона физических параметров [1-3]. Однако применение метода частиц требует больших вычислительных ресурсов – памяти и быстродействия ЭВМ. Это связано с тем, что в методе частиц в ячейках в области решения вводится сетка (шаг сетки определяет точность решения), в каждой ячейке которой размещается достаточно большое количество модельных частиц (до 1000 частиц) [4]. Но ещё большее ограничение на эффективность численной модели накладывает разномасштабность физических явлений, определяемых поведением легких (электроны) и тяжелых (ионы) частиц плазмы. В частности, временной шаг в численной модели подбирается из условий точности и устойчивости движения самых лёгких частиц, моделирующих электронную компоненту плазмы. Если при этом изучаемые эффекты определяются движением ионных компонент, то существенное ограничение при использовании модели будет связанным с большим временем счёта.

В общем случае динамика разреженной плазмы может быть описана системой уравнением Власова для функций распределения частиц каждой компоненты плазмы

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{r}} + q_{\alpha} \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{B}] \right) \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{p}} = 0, \quad (1)$$

и системой уравнений Максвелла с самосогласованными электромагнитными полями [1]:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{B} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} \vec{v} d\vec{v} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \vec{E} &= 4\pi \rho = 4\pi \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} d\vec{v}, \\ \operatorname{div} \vec{B} &= 0. \end{aligned}$$

Здесь α – сорт частиц (ионы или электроны), q_{α} – заряд частицы, $\vec{p}_{\alpha} = m_{\alpha} \vec{v}_{\alpha}$ – импульс частицы.

Для уменьшения требований к быстродействию и памяти ЭВМ, по сравнению с полностью кинетическими моделями, используются комбинированные (гибридные) модели. Их особенность состоит в том, что одна из компонент плазмы (ионы или электроны) описывается кинетически, а другая рассматривается в гидродинамическом приближении [5]. Гидродинамические уравнения для различных компонент плазмы могут быть получены из соответствующих кинетических уравнений при условии, что функция распределения частиц является равновесной или близка к этому состоянию. Например, для электронной компоненты этими условиями могут быть достаточно большая величина магнитного поля или высокая плотность плазмы. Для каждой конкретной задачи необходим анализ возможности использования гидродинамического приближения для какой-либо компоненты плазмы. В ходе расчётов необходимо следить за тем, чтобы параметры плазмы не выходили за пределы применимости гидродинамического приближения.

Рассмотрим распараллеливание алгоритмов при решении задач физики плазмы на основе следующей гибридной модели. Ионная компонента описывается с помощью кинетического уравнения (1), а для электронной компоненты использованы уравнения гидродинамического типа.

$$\begin{aligned} m_e \left(\frac{\partial \vec{V}_e}{\partial t} + (\vec{V}_e \cdot \nabla) \vec{V}_e \right) &= -e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{V}_e \times \vec{B} \right) - \frac{\nabla p_e}{n_e} + \vec{R}_e, \\ n_e \left(\frac{\partial T_e}{\partial t} + (\vec{V}_e \cdot \nabla) T_e \right) + (\gamma - 1) p_e \nabla \cdot \vec{V}_e &= (\gamma - 1) (Q_e - \nabla \cdot \vec{q}_e), \end{aligned}$$

где n_e, \vec{V}_e – плотность и скорость электронов, $p_e = n_e T_e$ – электронное давление, \vec{R}_e – сила трения между ионами и электронами, Q_e – нагрев электронов, $\vec{q}_e = -\kappa \nabla T_e$ – поток тепла.

В данной модели сделано допущение квазинейтральности плазмы ($n_e = n_i$) и пренебрегается токами смещения $\partial \vec{E} / \partial t$, что соответствует условиям малости как дебаевского радиуса по сравнению с характерными пространственными размерами, так и скоростей относительно скорости света.

Решение кинетического уравнения для ионной компоненты заменяется решением уравнений движения для модельных частиц, а гидродинамические уравнения для электронов решаются на сетке, так же, как и уравнения Максвелла.

Параллельные реализации разрабатываемых алгоритмов и использование их на современных суперЭВМ является естественным требованием для решения рассматриваемых задач с большими объемами данных и времени счёта. Современные суперкомпьютеры позволяют рассчитывать траектории миллиардов модельных частиц, что даёт возможность решать кинетическое уравнение Власова, не прибегая к дополнительным упрощениям. Несмотря на внутренний параллелизм метода частиц – траектории модельных частиц могут быть вычислены независимо друг от друга – построение параллельного алгоритма представляет собой нетривиальную задачу, а сам алгоритм зависит от особенностей рассматриваемых физических процессов и архитектуры используемого суперкомпьютера. Для каждой из решаемых задач необходим свой подход к созданию параллельного алгоритма.

Созданный и реализованный в данной работе алгоритм параллельных вычислений основан на декомпозиции по пространству и по частицам [6]. За каждую подобласть отвечает группа процессорных ядер, частицы области распределены по ядрам группы. На начальном этапе частицы фона и при инжекции частицы пучка распределяются равномерно между ядрами своей группы. Если частицы выходят из своей области, ее данные пересылаются одному из ядер соседней группы. Принятие данных по очереди также обеспечивает равномерную загрузку процессорных ядер в группе. Главные ядра группы в начале временного цикла рассылают данные для электромагнитных полей по группе, каждое ядро рассчитывает координаты и скорости частиц, и отправляет главному ядру группы плотности токи. Граничными сеточными данными обмениваются только главные ядра групп.

На данном этапе проведена серия тестовых расчетов на примере решения задачи взаимодействия ионного пучка с плазмой в открытой цилиндрической ловушке с радиусом $R=10$ см и длиной $L=30$ см. Магнитное поле катушек в центре системы $B_0=62$ Гс, пробочное отношение на оси равно 1.9. Плотность фоновой $n_0 = 10^{12}$ см⁻³. Температура инжектируемого ионного пучка $T_i=10$ эВ, плотность пучка $n_b=10^{14}$ см⁻³.

На рисунках показаны результаты расчетов для сетки 200×600 и $5 \cdot 10^5$ временных шагов $\tau=2 \cdot 10^{-4}$. Полное количество частиц $J_p=4.5 \cdot 10^6$, из них фоновых ионов $J_b=4.8 \cdot 10^5$. На рис. 1 и 2 изображено магнитное поле $|B|$ в единицах B_0 в момент времени $t=0$ и $t=110 \omega_{ci}$, где $\omega_{ci} = eB_0/m_i c$ - ионная циклотронная частота.

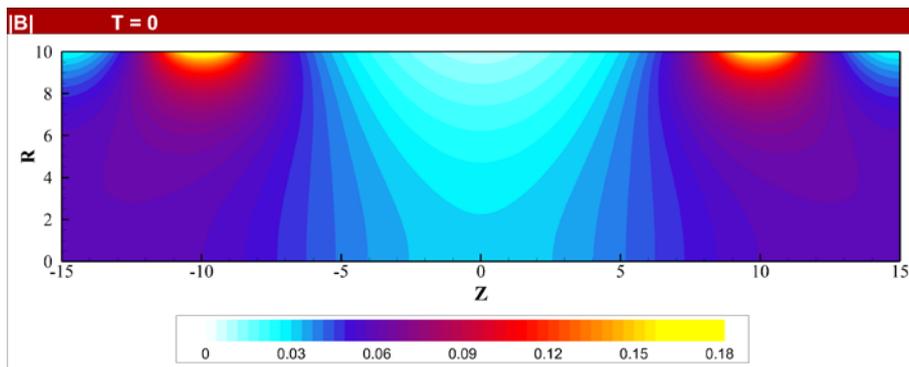


Рис. 1. Поле $|B|$, $t=0$

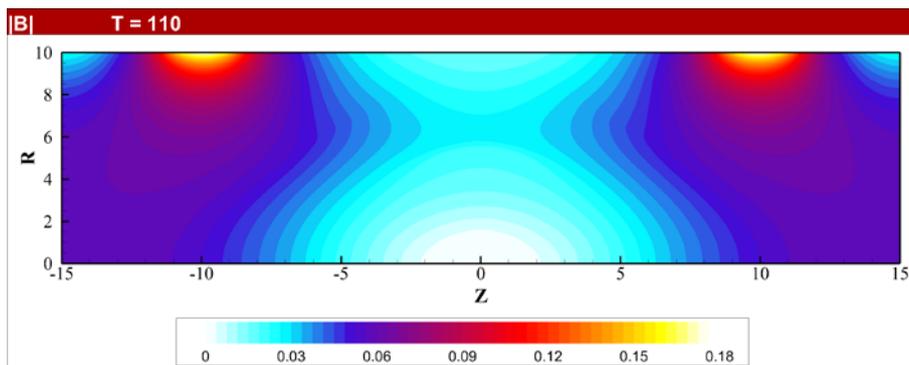


Рис. 2. Поле $|B|$, $t=110$

В результате инжекции пучка происходит вытеснение магнитного поля и формирование магнитной каверны. Рис. 3 демонстрирует сгущение фоновой плазмы и образование плазменной каверны. Таким образом становится возможным теоретически ожидаемое удержание и нагрев плазмы внутри возникающего магнитного «пузыря».

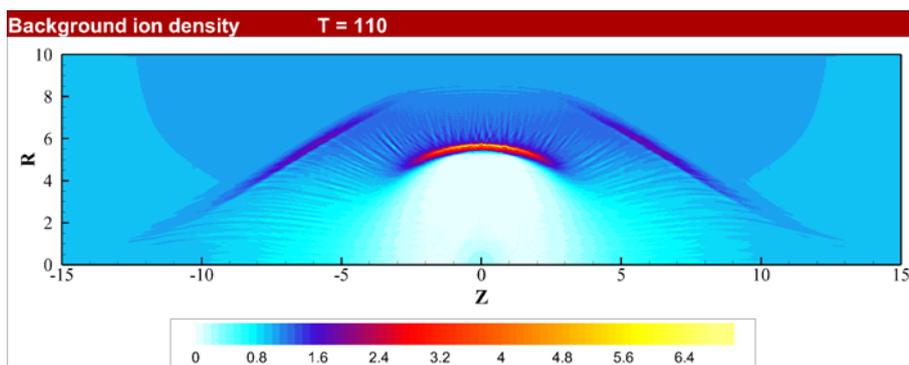


Рис. 3. Плотность ионов фона, $t=110$

Для проведения расчетов было использовано 60-72 процессорных ядер в 30-40 группах. В двух центральных группах было максимальное число ядер N_c , а далее их количество линейно падало при удалении от центра. Так, для случая 30 групп с 60 ядрами $N_c = 6$, для 30-72 $N_c = 7$, для 40-60 $N_c = 5$, для 40-72

распределение ядер аналогично случаю 30-60, но в средней группе добавлено еще одной ядро. На рис. 4,5 приведены значения среднего количества частиц в ядрах в зависимости от координаты области, которую обрабатывала группа ядер для моментов времени $t=20$ и $t=80$.

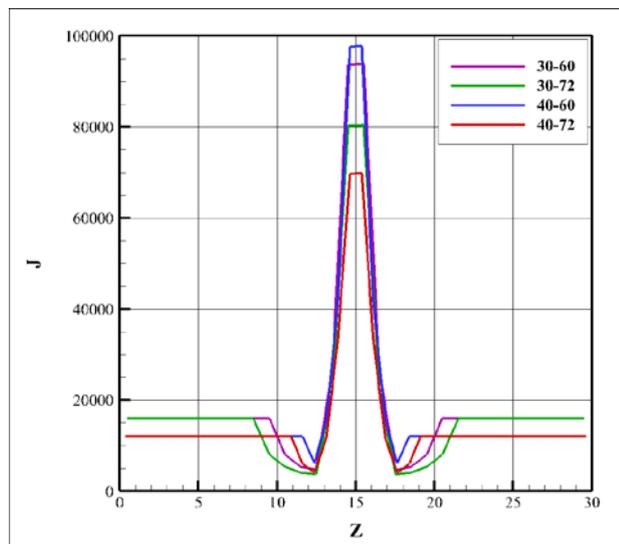


Рис. 4. Среднее количество частиц в группе, $t=20$

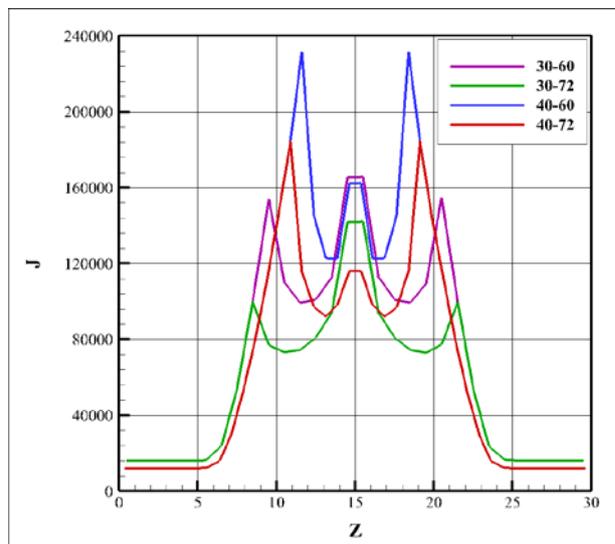


Рис. 5. Среднее количество частиц в группе, $t=80$

При малых временах пучок сосредоточен в центре области и ионы пучка обрабатываются центральными группами, а ионы фона распределены равномерно. Распределение 40-72 является самым эффективным за счет более узкой подобласти и частиц в ней и за счет большего количества процессоров в группе. Увеличение полного числа ядер с 60 до 72 уменьшает количество частиц в каждом ядре и ускоряет расчеты. Разбиение на 40 групп вместо 30 приводит к меньшему числу частиц в подобласти, однако, и количество процессоров в группе меньше. В данном случае это привело к увеличению числа частиц в ядре. При больших временах расчетов пучок занимает все большую часть области, максимальное количество частиц приходится на более удаленные от центра группы, и наличие большего числа ядер в центральных группах становится неэффективным (рис. 5).

Для указанных параметров время работы составило 78 часа. В таб. 1 приведено время работы программы в секундах с более крупным временным шагом $\tau=2 \cdot 10^{-3}$ при различном распределении процессоров.

30-60	30-72	40-60	40-72
42092	35573	33925	32674

Таблица 1. Времена работы программы

При этом время расчетов зависит более всего от процедуры пересчета частиц и расчета токов и плотностей по частицам в узлах сетки, суммарно они

занимают ~98% времени работы программы. При этом расчет скоростей и координат частиц занимает 58-65%, а расчет средних скоростей и плотности частиц – 30-40%. Вычисления главными процессорами групп на сетках занимают 1.5-2%, из которых малое время 0.1% идет на обмены границами двумерных массивов. Рассылка и сбор двумерных массивов в группах (MPI_Bcast + MPI_Reduce) занимает также малое время 0.1%. Пересылки частиц не интенсивны, и поэтому время их ~ 0.01% от общего времени расчета.

Неравномерное распределение ядер по группам обеспечило равномерное распределение частиц в процессорах и возможность проведения численных экспериментов с большим количеством частиц. Однако, любая статическая балансировка неэффективна на различных стадиях моделирования процесса за счет существенно нелинейной динамики частиц в области. Динамическая балансировка загрузки должна существенно ускорить вычисления.

Расчеты проводились с использованием процессоров Intel Xeon Phi 7290 Сибирского суперкомпьютерного центра, ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 18-29-21025-мк. Концепция гибридной модели создана в рамках гос. задания ИВМиМГ СО РАН (проект 0315–2019–0009).

Литература

1. Березин Ю.А., Вшивков В.А. Метод частиц в динамике разреженной плазмы, Новосибирск, Наука, 1980.
2. Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование, М.: Энергоатомиздат, 1989.
3. Березин Ю.А. Дудникова Г.И., Лисейкина Т.В. Федорук М.П. Моделирование нестационарных плазменных процессов, Новосибирск: НГУ, 2017.
4. Lotov K. V., Timofeev I. V., Mesyats E. A., et al., Phys. Plasmas 22 (2015)
5. Вшивкова Л.В. Численное моделирование динамики многокомпонентной плазмы // Вестник НГУ, Серия «Математика, механика, информатика», Том III, Выпуск 2, С. 3–20, 2003.
6. Boronina M. A., Vshivkov V.A., J. of Plasma Phys., 81(6), 495810605 (2015)

References

1. Berezin Yu.A., Vshivkov V.A. Metod chastits v dinamike razrezhennoi plazmy, Novosibirsk, Nauka, 1980.
2. Birdsall Ch.K., Langdon A.B. Plasma physics via computer simulation. McGraw-Hill Book Company, 1985.
3. Berezin Yu.A., Dudnikova G.I., Liseikina T.V., Fedoruk M.P. Simulation of non-stationary plasma processes. Novosibirsk, NGU, 2017.
4. Lotov K. V., Timofeev I. V., Mesyats E. A., et al., Phys. Plasmas 22 (2015)

5. Vshivkova L.V. Numerical modelling of dynamics of multicomponent plasma // Vestnik NSU, Ser. «Mathematics, mechanics, informatics», V. III, Iss. 2, P. 3–20, 2003.
6. Boronina M. A., Vshivkov V.A., J. of Plasma Phys., 81(6), 495810605 (2015)