Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Физический факультет, кафедра общей физики и волновых процессов
Международный учебно-научный лазерный центр
НОЦ «Суперкомпьютерные технологии»

Сравнительный анализ параллельных численных алгоритмов решения нелинейного уравнения квазиоптики

Дергачёв А. А., Ефимов О. В., Сметанина Е. О.

14 декабря 2009

Приложения филаментации

- Экологический мониторинг атмосферы

  широкий спектр суперконтинуума

- Удаленное зондирование мишеней

  высокая интенсивность

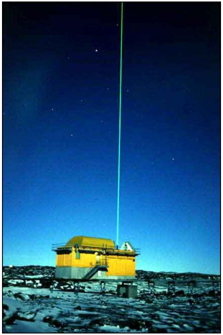
- Управляемый газовый разряд

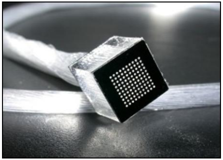
  высокая линейная плотность плазмы

- Микро-модификация оптических материалов

  малый размер филамента

  высокая интенсивность





Постановка задачи

Параболическое уравнение квазиоптики:

$$2\mathbf{i}k\frac{\partial E}{\partial z} = \Delta_\perp E + \frac{2k^2}{n_0} n_2 |E|^2 E$$

Начальные условия:

$$E(x, y, z = 0) = E_0 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2r_0^2}\right)$$

Постановка задачи

Обезразмеренная задача:

$$\begin{cases} 2\mathbf{i}\dfrac{\partial E}{\partial z} = \Delta_\perp E + R|E|^2 E \\ E(x, y, z = 0) = \exp\left(-\dfrac{x^2 + y^2}{2}\right) \end{cases}$$

Численные методы решения задачи

- Явная разностная схема: метод Рунге-Кутта
  прост в реализации, но имеет проблемы с устойчивостью
  и требует многократного расхода памяти
- Фурье-метод с расщепление по физическим факторам
  необходимо большое число пересылок
  существует много реализаций
- Неявная разностная схема: метод прогонки
  сложен в реализации, меньше пересылок, но нужна временная память

Явная схема: метод Рунге-Кутта

Последовательный алгоритм:

```
функция шаг_рунге_кутта_4(поле[], dz, f())
{
    k1[] = f(поле[]);

    k2[] = f(поле[] + k1[]*dz/2);

    k3[] = f(поле[] + k2[]*dz/2);

    k4[] = f(поле[] + k3[]*dz);

    return поле[] + (k1[] + 2*k2[] + 2*k3[] + k4[])*dz/6;
}
```

Явная схема: метод Рунге-Кутта

???

Явная схема: метод Рунге-Кутта

Параллельный алгоритм:

```
функция шаг_рунге_кутта_4(поле[], dz, f())
{
    k1[] = f(поле[]);
    обмен_границами(k1[]);

    k2[] = f(поле[] + k1[]*dz/2);
    обмен_границами(k2[]);

    k3[] = f(поле[] + k2[]*dz/2);
    обмен_границами(k3[]);

    k4[] = f(поле[] + k3[]*dz);
    обмен_границами(k4[]);

    return поле[] + (k1[] + 2*k2[] + 2*k3[] + k4[])*dz/6;
}
```

Фурье-метод

$$2\mathbf{i}\frac{\partial E}{\partial z} = \Delta_\perp E + R|E|^2 E$$

$$\begin{aligned} 2\mathbf{i}\frac{\partial E(z_i)}{\partial z} &= \Delta_\perp E(z_i) \\ E(z_i) &\longrightarrow \hat{E}(z_i) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2\mathbf{i}\frac{\partial \hat{E}(z_i)}{\partial z} &= R|E(\hat{z}_i)|^2 \hat{E}(z_i) \\ E(z_i + \Delta z) &= E(\hat{z}_i)\exp(-\frac{\mathbf{i}}{2}R\left|E(\hat{z}_i)\right|^2 \Delta z) \end{aligned}$$

Фурье-метод

$$2\mathbf{i}\frac{\partial E}{\partial z} = \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} \quad \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \quad \left[E(x,y,z) = \sum_{j,k} \tilde{E}_{jk}(z) \exp\left\{\frac{2\pi\mathbf{i}jx}{N}\right\} \exp\left\{\frac{2\pi\mathbf{i}ky}{N}\right\} \right] \quad \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \quad 2\mathbf{i}\frac{\partial \tilde{E}}{\partial z} = \left(\frac{2\pi\mathbf{i}}{N}\right)^2 (j^2 + k^2)\tilde{E}(z) \quad \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \quad \tilde{E}_{jk}(z + \Delta z) = \tilde{E}_{jk}(z) \exp\left\{\mathbf{i}\frac{2\pi^2}{N^2}(j^2 + k^2)\Delta z\right\}$$

Фурье-метод

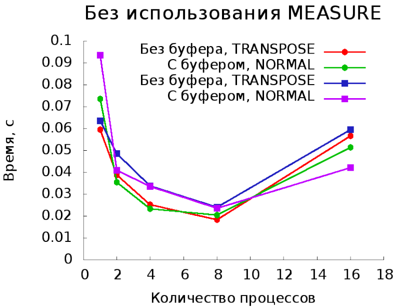
$$\text{Итого:}\quad E(x,y,z_i) \xrightarrow{\text{2D FFT}} \tilde{E}_{jk}(0) \longrightarrow$$

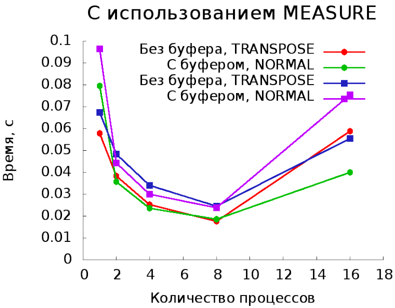
$$\longrightarrow \quad \tilde{E}_{jk}(0)\exp\left\{\mathbf{i}\frac{2\pi^2}{N^2}(j^2+k^2)\Delta z\right\} \xrightarrow{\text{2D FFT}^{-1}} E(x,y,z_i+\Delta z)$$

Profit!

Опции FFTW

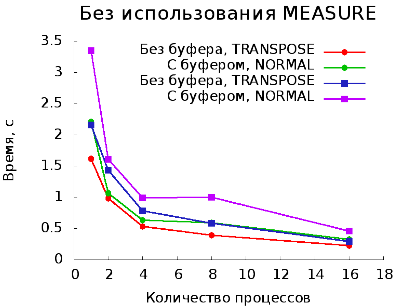
$$N = 512$$

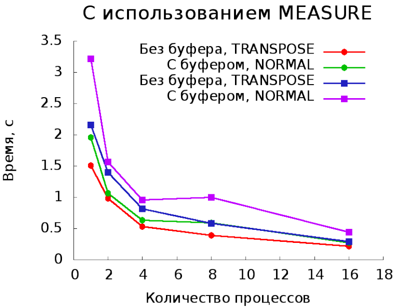




Опции FFTW

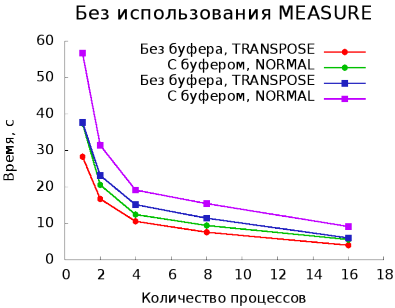
$$N = 2048$$

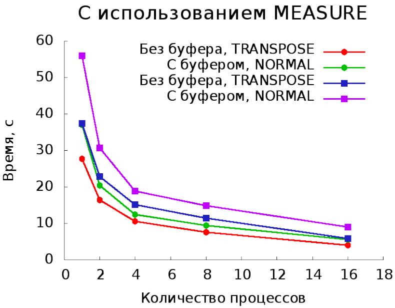




Опции FFTW

$$N = 8192$$





Минивывод: «лучшее враг хорошего»

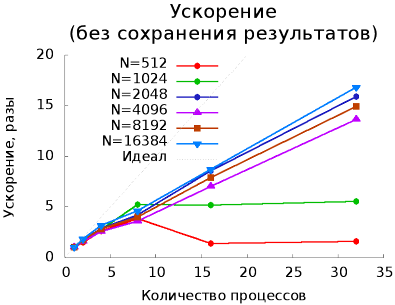
Таким образом, обычно быстрее всего работает вариант без дополнительного буфера и с опцией FFTW_TRANSPOSED_ORDER, f использование дополнительно опции FFTW_MEASURE не позволяет получить ощутимый прирост производительности.

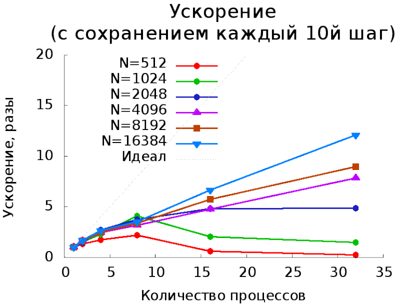
Зависимость времени такта от опций компиляции:

Опция	$np = 8$	$np = 16$
-O2 (по умолчанию)	9.0 с	5.0 с
-O1	9.2 с	5.3 с
-O3	8.8 с	5.1 с
-Os	9.0 с	5.2 с
-fast	8.9 с	5.2 с

Результаты замеров времени для лучшего набора опций

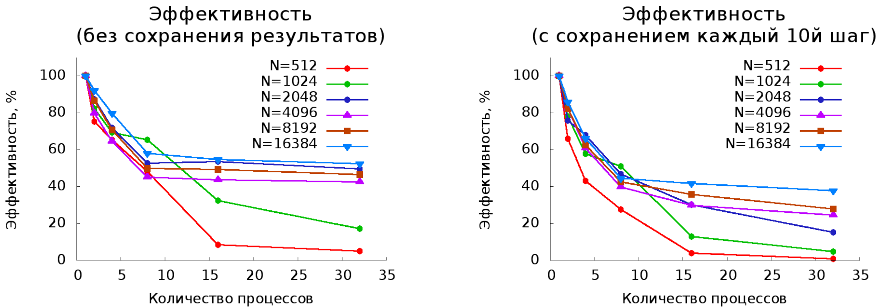
Ускорение параллельной программы





Результаты замеров времени для лучшего набора опций

Эффективность параллельной программы

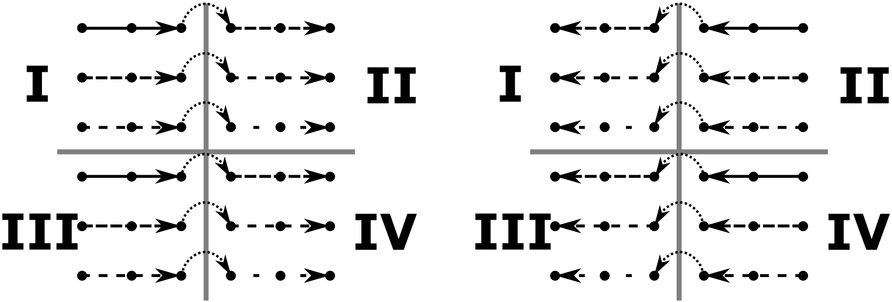


Неявная схема: метод прогонки

$$
\begin{cases}
2\mathrm{i}\dfrac{h_1}{2}\dfrac{\hat{E}_{0,j}-E^k_{0,j}}{\Delta z} = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\hat{E}_{1,j}-\hat{E}_{0,j}}{h_1}\right) + \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{E^k_{1,j}-E^k_{0,j}}{h_0}\right) \\
2\mathrm{i}\dfrac{h_{i+1}+h_i}{2}\dfrac{\hat{E}_{i,j}-E^k_{i,j}}{\Delta z} = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\hat{E}_{i+1,j}}{h_{i+1}} - \left(\dfrac{1}{h_{i+1}}+\dfrac{1}{h_i}\right)\hat{E}_{i,j} + \dfrac{\hat{E}_{i-1,j}}{h_i}\right) \\
\qquad + \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{E^k_{i+1,j}}{h_{i+1}} - \left(\dfrac{1}{h_{i+1}}+\dfrac{1}{h_i}\right)E^k_{i,j} + \dfrac{E^k_{i-1,j}}{h_i}\right) \\
2\mathrm{i}\dfrac{h_N}{2}\dfrac{\hat{E}_{N,j}-E^k_{N,j}}{\Delta z} = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\hat{E}_{N,j}-\hat{E}_{N-1,j}}{h_N}\right) + \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{E^k_{N,j}-E^k_{N,j}}{h_{N-1}}\right)
\end{cases}
$$

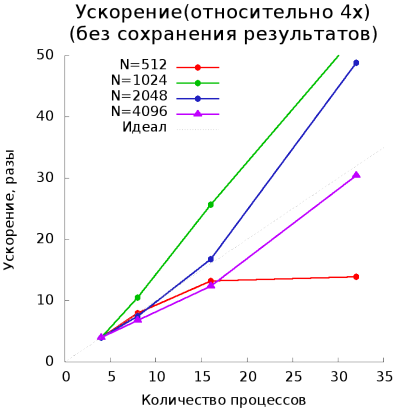
Если шаг сетки равномерный, то есть $h_i = x_i - x_{i-1} = const$, то схема переходит в хорошо известную схему Кранка-Николсона.

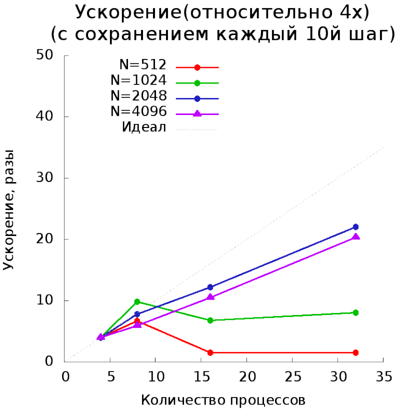
Неявная схема: метод прогонки



Результаты замеров времени СКИФ «Чебышёв»

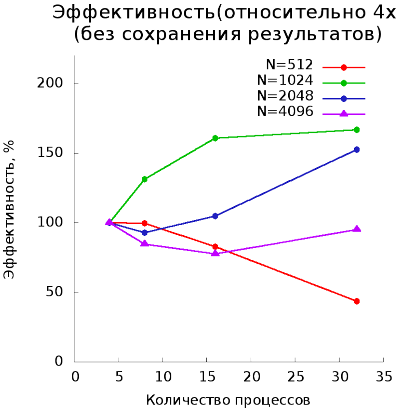
Ускорение параллельной программы

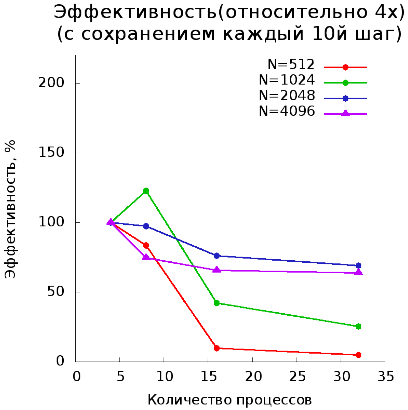




Результаты замеров времени СКИФ «Чебышёв»

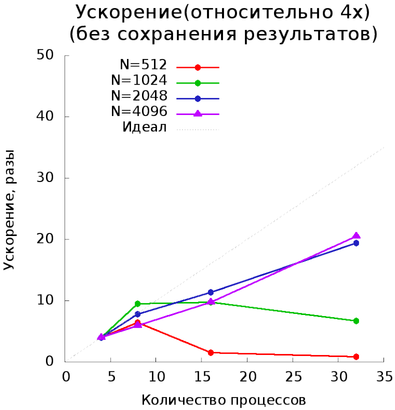
Эффективность параллельной программы

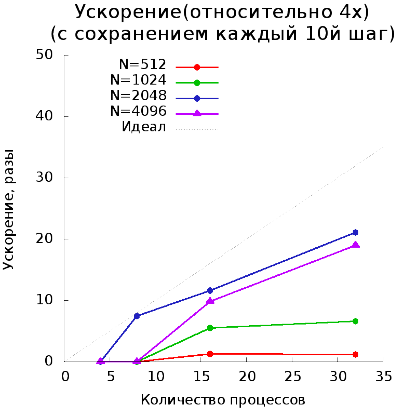




Результаты замеров времени IBM Bluegene/P

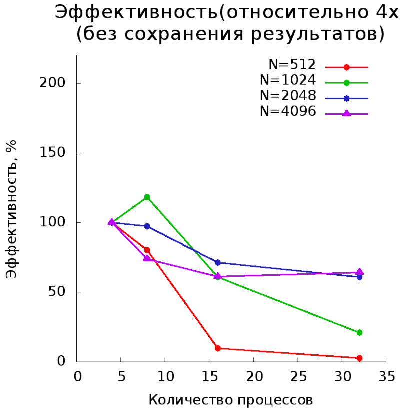
Ускорение параллельной программы

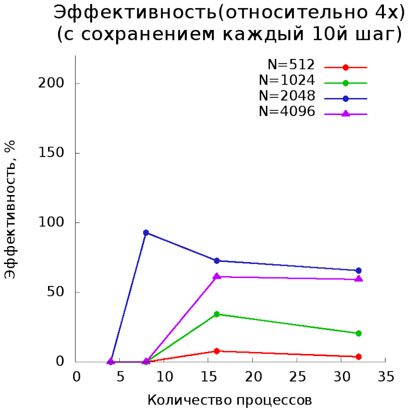




Результаты замеров времени IBM Bluegene/P

Эффективность параллельной программы





Основные результаты

- Было проведено исследование работы 3х алгоритмов решения нелинейного уравнения квазиоптики: явной схемы с применением метода Рунге-Кутта 4-го порядка, неявной консервативной схемы, решаемой методом прогонки и метода с использованием БПФ.
- Выяснено, что явная схема обладает слишком большими требованиями к шагу интегрирования, что усложняет её применение в повседневных задачах. Среди оставшихся методом неявная схема лучше по масштабируемости, что на соответствуюшем кластере может дать преимущество.
- Исследована зависимость времени расчёта БПФ с использованием библиотеки FFTW и найдены оптимальные значения опций.
- Выбор метода решения может определяться физической постановкой задачи.

Спасибо за внимание!

Авторы:

Дергачёв А. А. <dergachev88@yandex.ru>
Ефимов О. В. <efimovov@yandex.ru>
Сметанина Е. О. <jannes-2002@yandex.ru>

благодарят администрацию СКИФ МГУ «Чебышёв» за терпимость к ночным загрузкам, администрацию IBM Blugene/P ВМиК МГУ за предоставленные приоритеты и участников http://xkcd.ru за добротный перевод комиксов.

Исходный код работы доступен по адресу
https://github.com/Sannis/papers_and_talks/
Fork us on GitHub!

Содержание

Уравнение медленно меняющейся волны

$$2\mathbf{i}k\frac{\partial E}{\partial z} = \left(1 - \frac{i}{\omega}\frac{\partial}{\partial t}\right)^{-1}\Delta_{\perp}E - k\frac{\partial^2 k}{\partial\omega^2}\frac{\partial E^2}{\partial t^2} + \frac{i}{3}k\frac{\partial^3 k}{\partial\omega^3}\frac{\partial^3 E}{\partial t^3} + \\ + \frac{2k^2}{n_0}\left[\left(1 - \frac{i}{\omega}\frac{\partial}{\partial t}\right)\Delta n_k + \left(1 + \frac{i}{\omega}\frac{\partial}{\partial t}\right)\Delta n_p\right]E - ik\alpha E$$