

0.1. Колганова А.О. Параллельная реализация новой модификации алгоритма Барнса — Хата для расчета парных взаимодействий частиц на плоскости

Прямой алгоритм расчета парных взаимодействий частиц имеет квадратичную вычислительную сложность, что ограничивает его использование задачами, в которых число частиц не превышает десятков тысяч. От современных лагранжевых методов требуется весьма высокое разрешение, для этого число частиц должно иметь порядок миллионов.

«Экстенсивный» путь решения проблемы — применение технологий параллельных вычислений, однако проблему квадратичной сложности такой подход не решает. Решением проблемы является применение приближенных быстрых алгоритмов, имеющих квазилинейную вычислительную сложность $O(N \log^\alpha N)$, $\alpha \geq 0$. Наиболее известны методы Барнса — Хата и быстрый метод мультиполей.

В работе представлена параллельная реализация «гибридной» модификации, в основе которой — обход дерева по аналогии с методом Барнса — Хата и построение достаточно «длинных» мультипольных и локальных разложений функции влияния. Расчет производится для точечных вихревых частиц; подобная задача возникает в вихревых методах вычислительной гидродинамики при моделировании плоских течений.

Последовательная реализация алгоритма не вызывает затруднений, однако создание параллельной версии, эффективно работающей на десятках вычислительных ядер (рассматриваются машины с общей памятью) наталкивается на проблему масштабируемости рекурсивных алгоритмов построения дерева. Данная проблема решена путем генерации k -d дерева на основе фрактальной кривой Мортонна [1]. Результирующее дерево не является адаптивным, но данный недостаток лишь незначительно снижает производительность всего алгоритма, в то время как процедура построения становится мало-затратной и хорошо распараллеливаемой.

Для набора из $N = 2 \cdot 10^6$ вихревых частиц в последовательном режиме при расчете на двухпроцессорном сервере (2 x Intel Xeon Gold 6524) при обеспечении относительной погрешности $\varepsilon = 10^{-5}$ время построения дерева (ТВК) составляет 0.82 с, время расчета мультипольных моментов (СКК) — 1.31 с, время вычисления скоростей частиц (ФСК) — 5.44 с.

Ниже показано, во сколько раз ускоряются все части алгоритма при проведении того же расчета на 4, 16 и 32 ядрах:

Число ядер	ТВК	СКК	ФСК
4	3.28	3.74	3.68
16	9.88	14.6	14.6
32	12.1	27.3	28.9

Построение дерева масштабируется хуже остальных

операций, но является наименее трудоемкой частью последовательного алгоритма.

Ниже дано сравнение времени решения той же задачи в миллисекундах в зависимости от обеспечиваемой точности при помощи вышеописанного кода (OpenMP) и разработанной на основе кода [2] модификации гибридного алгоритма для графических ускорителей (CUDA, расчет произведен на GPU Nvidia Tesla V100).

Погрешность	OpenMP	CUDA
10^{-3}	211	26
10^{-5}	306	51
10^{-7}	439	90

Эффективность расчетов на GPU снижается с увеличением обеспечиваемой точности.

Реализованные алгоритмы позволяют значительно повысить эффективность выполнения расчетов методами частиц, в частности, вихревыми методами. Исходный код разработанных алгоритмов доступен в репозитории <https://github.com/vortexmethods/fastm>.

Научный руководитель — д.ф.-м.н. Марчевский И. К.

Список литературы

- [1] KARRAS T. Maximizing Parallelism in the Construction of BVHs, Octrees, and k -d Trees // Proc. Intern. Conf. «Eurographics / ACM SIGGRAPH Symposium on High Performance Graphics». The Eurographics Association, 2012. P. 33–37.
- [2] BURTSCHER M., PINGALI K. An Efficient CUDA Implementation of the Tree-Based Barnes Hut n -Body Algorithm // GPU Computing Gems Emerald Edition. 2011. Ch. 6. P. 75–92.