

Матрично-свободная спектральная реализация и параллельное ускорение методов BiCGStab и BiCGStab(ℓ) для задачи магнитной индукции

К. А. Жуков, Чжан С.

Аннотация—Предметом исследования является параллельная реализация итерационных методов BiCGStab и BiCGStab(ℓ) для вспомогательных линейных задач, возникающих при вычислении магнитного α -эффекта. Рассматривается уравнение магнитной индукции в периодической трёхмерной области. После спектральной дискретизации задача сводится к решению больших несимметричных систем линейных алгебраических уравнений, для которых полная матрица оператора не строится. Методология работы основана на матрично-свободном применении оператора магнитной индукции, использовании быстрого (дискретного) преобразования Фурье (БПФ) для переходов между физическим и спектральным пространствами, предобусловленных методах подпространств Крылова и параллельных реализациях с технологиями OpenMP и MPI. Научная новизна состоит в построении единого матрично-свободного спектрального решателя, пригодного для методов BiCGStab и BiCGStab(ℓ), и в сравнении нескольких вариантов параллельной организации вычислений, включая библиотечную реализацию БПФ FFTW-MPI, ручное 2D pencil-разложение данных по процессам и библиотечный вариант БПФ на основе heFFTe. В численных экспериментах для сетки $N = 96$ OpenMP-реализация BiCGStab уменьшила время решения примерно в 13 раз при 32 потоках, а оптимизация OpenMP-версии BiCGStab(ℓ) снизила время при 32 потоках еще на 62.0%. MPI-реализация BiCGStab на основе ручного 2D pencil-разложения уменьшила время на 32 процессах на 13.6% по сравнению с базовым FFTW-MPI-вариантом. Дополнительное исследование сходимости итерационных методов по параметру магнитной диффузии показало, что увеличение степеней ℓ расширяет область устойчивой сходимости при малых значениях этого параметра.

Ключевые слова—магнитная индукция, магнитный α -эффект, BiCGStab, BiCGStab(ℓ), матрично-свободный метод, спектральный метод, FFT, OpenMP, MPI, 2D pencil-разложение, heFFTe

I. Введение

Задача генерации магнитного поля в электропроводящей среде является одной из центральных задач магнитной гидродинамики. В кинематическом приближении поле скорости считается заданным, а эволюция магнитного поля описывается уравнением магнитной индукции. Такая постановка используется при исследовании динамо-механизмов и магнитного α -эффекта, играющего важную роль в теории среднего поля [1], [2]. Близкие задачи генерации магнитного поля пространственно-

периодическими трёхмерными течениями рассматривались, например, в работе [3].

При многомасштабном анализе магнитного α -эффекта возникают вспомогательные линейные задачи с оператором магнитной индукции. Эти задачи требуют многократного решения систем вида

$$\mathfrak{L}\mathbf{b} = \mathbf{f}, \quad (1)$$

где $\mathbf{b}$ — неизвестное магнитное поле, $\mathbf{f}$ — заданная правая часть, а $\mathfrak{L}$ — несимметричный оператор магнитной индукции. Для трёхмерной сетки N^3 число неизвестных имеет порядок $3N^3$, поэтому явное построение и хранение матрицы оператора становится нецелесообразным. Кроме того, структура оператора естественно согласуется со спектральной реализацией, в которой действие дифференциальных операторов вычисляется через преобразования Фурье.

Целью данной работы является построение и исследование матрично-свободной спектральной реализации методов BiCGStab и BiCGStab(ℓ) для задачи (1), а также анализ эффективности параллельных вариантов программы на системах с общей и распределённой памятью. Основное внимание уделяется практическому времени решения, масштабируемости и устойчивости сходимости при уменьшении магнитной диффузии.

Методическая основа работы находится на пересечении нескольких направлений. Спектральные методы естественно подходят для периодических задач и позволяют эффективно вычислять дифференциальные операторы в пространстве Фурье [4], [5]. Для возникающих несимметричных систем применяются методы подпространств Крылова и их стабилизированные варианты [6], [7], [8], [9]. С вычислительной точки зрения ключевую роль играют многократные трёхмерные БПФ, поэтому для распределённой памяти важны схемы распределения данных по процессам: одномерные (slab) и двумерные (pencil) разложения, используемые в библиотеках и реализациях параллельных БПФ [10], [11], [12], [13].

II. Постановка задачи

В кинематической магнитной гидродинамике эволюция магнитного поля $\mathbf{b}$ при заданном поле скорости $\mathbf{v}$ описывается уравнением

$$\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} = \eta \Delta \mathbf{b} + \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{b}), \quad \nabla \cdot \mathbf{b} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

Константин Андреевич Жуков, МГУ им. М. В. Ломоносова, факультет ВМК, кафедра суперкомпьютеров и квантовой информатики, Москва, Россия (e-mail: zhukov_k@cs.msu.ru).

Чжан Синьуй, МГУ им. М. В. Ломоносова, факультет ВМК, кафедра суперкомпьютеров и квантовой информатики, Москва, Россия (e-mail: chzhans@my.msu.ru).

где η — магнитная диффузия. В работе рассматриваются гладкие пространственно-периодические поля в ячейке $\mathbb{T}^3 = [0, 2\pi]^3$. Оператор магнитной индукции имеет вид

$$\mathcal{L}\mathbf{b} = \eta\Delta\mathbf{b} + \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{b}). \quad (3)$$

В задачах вычисления магнитного α -эффекта требуется решать несколько вспомогательных систем с одним и тем же оператором (3), но с различными правыми частями. После дискретизации эти системы являются большими и несимметричными. Поэтому для их решения часто применяются итерационные методы подпространств Крылова, использующие оператор только через процедуру вычисления $\mathcal{L}\mathbf{b}$.

III. Матрично-свободная спектральная реализация

Периодические граничные условия позволяют использовать разложение в ряд Фурье; такой подход является стандартным для спектральных и псевдоспектральных методов в периодических задачах [4], [5]:

$$\mathbf{b}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} \hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}. \quad (4)$$

В спектральном пространстве дифференциальные операторы принимают простой вид:

$$\widehat{\Delta\mathbf{b}}_{\mathbf{k}} = -|\mathbf{k}|^2 \hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}}, \quad \mathcal{F}[\nabla \times \mathbf{g}]_{\mathbf{k}} = i\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{k}}. \quad (5)$$

Это позволяет вычислять диффузионный вклад непосредственно в спектральном пространстве. Член $\nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{b})$ вычисляется комбинированно: поле $\mathbf{b}$ переводится в физическое пространство, затем поточечно строится $\mathbf{v} \times \mathbf{b}$, после чего результат снова переводится в спектральное пространство и к нему применяется оператор ротора.

Таким образом, действие оператора (3) реализуется как последовательность прямых и обратных БПФ и локальных операций над массивами. В программе не строится и не хранится полная матрица дискретного оператора; вместо этого используется только отображение

$$\mathbf{b} \mapsto \mathcal{L}\mathbf{b}.$$

Для преобразований Фурье в последовательной и OpenMP-версиях используется библиотечная реализация FFTW [10]. Рабочие буферы и планы БПФ создаются заранее и затем многократно переиспользуются.

Для ускорения сходимости применяется спектральный предобуславливатель, аппроксимирующий обращение жёсткой части оператора. В качестве предобуславливателя рассматривается оператор $\eta\Delta - \beta v_0 \cdot \nabla$ в спектральном пространстве, где v_0 среднеквадратичное значение поля скорости, а β некоторый коэффициент, подбираемый эмпирически. Данный предобуславливатель легко обращается в спектральном пространстве коэффициентов Фурье, кроме того он учитывает влияние как диффузионной части, так и конвективной части оператора $\mathcal{L}$, такой подход особенно важен при малых значениях параметра магнитной диффузии, когда относительная роль переноса возрастает и одной лишь диффузионной аппроксимации может быть недостаточно.

IV. Итерационные методы

Метод BiCGStab [8] является одним из стандартных методов подпространств Крылова для решения несимметричных систем линейных алгебраических уравнений [6], [7]. Его достоинством является сравнительно низкая стоимость одной итерации: на каждой итерации выполняются несколько скалярных произведений, линейных комбинаций векторов и применений оператора.

Метод BiCGStab(ℓ) [9] обобщает стандартный BiCGStab за счёт стабилизирующего полинома степени ℓ . Одна большая итерация этого метода включает блок BiCG-шагов и последующую минимизацию невязки в малом подпространстве. Такая схема требует дополнительных рабочих векторов и большего числа локальных операций, но может обеспечивать более устойчивую сходимость в трудных режимах.

В реализованной программе оба метода используют общий интерфейс матрично-свободного оператора и предобуславливателя. Это позволяет сравнивать их в одинаковой вычислительной постановке. В качестве критерия остановки используется значение истинной невязки меньше, чем $5 \cdot 10^{-10}$ либо достижение максимального числа итераций, которые в данном случае равны 4000. Кроме того данная реализация делает рестарт, если рекуррентная невязка достигла заданной точности, а истинная невязка нет. Допускается до 10 рестартов.

V. Параллельная реализация

OpenMP-реализация [14] ориентирована на один вычислительный узел с общей памятью. Распараллеливаются локальные операции над компонентами векторных полей, вычисление скалярных произведений и норм, а также многопоточные преобразования Фурье. Отдельно исследуется влияние числа потоков и стратегии их привязки к ядрам, поскольку для вычислительных узлов с несколькими процессорами размещение потоков влияет на доступ к физической памяти и кэшам.

MPI-реализация [15] ориентирована на модель распределённой памяти. В работе сравниваются три варианта организации распределённых спектральных преобразований. Базовая версия использует библиотеку FFTW-MPI, которая использует одномерное slab-разбиение данных по процессам. Оптимизированная версия использует ручное двумерное pencil-разложение, при котором данные распределяются по двум пространственным направлениям, а перестановки данных между стадиями трёхмерного быстрого преобразования Фурье выполняются явно. Такая схема согласуется с распространённой организацией параллельных трёхмерных преобразований Фурье на основе двумерного разложения данных [11], [12]. В отличие от универсальных библиотечных интерфейсов, ручная реализация позволяет сохранить структуру рабочих массивов, необходимую оператору магнитной индукции, и явно контролировать перестановки данных и использование буферов. Дополнительно был реализован библиотечный вариант на основе heFFTe [13], также использующий двумерное pencil-разложение данных по процессам, что позволяет сопоставить ручную реализацию с готовой библиотечной.

VI. Численные эксперименты

Верификационные эксперименты проводились на аналитической тестовой задаче при $N = 64$ и $\eta = 0.1$. Для проверки оператора использовались периодическое поле скорости

$$\mathbf{v}(x, y, z) = \begin{pmatrix} \sin z + 0.6 \cos y \\ 0.8 \sin x + \cos z \\ 0.6 \sin y + 0.8 \cos x \end{pmatrix}$$

и аналитическое магнитное поле

$$\mathbf{b}_{\text{ex}}(x, y, z) = \begin{pmatrix} e^{\sin y} \cos z \\ e^{\sin z} \cos x \\ e^{\sin x} \cos y \end{pmatrix}.$$

Правая часть задавалась как точное применение оператора:

$$\mathbf{f}_{\text{ex}} = \eta \Delta \mathbf{b}_{\text{ex}} + \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{b}_{\text{ex}}).$$

Из таблицы I видно, что максимальная ошибка применения оператора имеет порядок 10^{-13} , а истинная невязка и ошибка численного решения остаются малы. Это подтверждает корректность матрично-свободной спектральной реализации и позволяет перейти к анализу производительности.

A. OpenMP-результаты

OpenMP-эксперименты проводились на одном узле кластера ЦХАБД. Узел содержит два процессора Intel Xeon Gold 6140 по 18 физических ядер, каждый из процессоров имеет 6-ти каналную память DDR4-2666 MHz общим объемом 192 GB. Во всех основных OpenMP-запусках использовались параметры $N = 96$, $\eta = 0.1$, включённый предобуславливатель и одинаковый критерий контроля истинной невязки.

Лучшее время в рассмотренной серии составило 16.86 с при 32 потоках и стратегии `socket-sparse-balanced`. В этой стратегии потоки распределяются максимально равномерно между сокетами, а рамках одного сокета также равномерно между имеющимися ядрами. Переход к 36 потокам не дал дополнительного выигрыша. Запуски без явной привязки потоков были хуже в области большого числа потоков: при 32 потоках явное размещение уменьшало время решения примерно на 18–22% по сравнению с запуском без привязки. Результаты сравнения различных стратегий привязки продемонстрированы на рис. 1, кроме упомянутой выше `Socket-Sparse-Balance(Socket Sparse)` рассматривались классические стратегии: `Close`, (распределение потоков по ядрам наиболее компактным способом) `Spread` (распределение потоков по ядрам наиболее равномерным образом), а также стратегия `Socket-Balanced`, в которой нити сначала распределяются максимально равномерно между сокетами, а в рамках одного сокета максимально компактно. Результаты по масштабируемости наилучшей стратегии `Socket-Sparse-Balance` отражены в таблице II.

Отдельно была оптимизирована OpenMP-реализация `BiCGStab( $\ell$ )`. Профилирование Intel VTune [16] показало значительные накладные расходы OpenMP в исходном варианте. После уменьшения числа лишних барьеров и укрупнения параллельных участков показатель *Spin and*

Overhead Time снизился с 47.3% до 10.3% CPU time, а эффективная загрузка CPU выросла с 32.0% до 50.1%.

В рабочей точке 32 потока оптимизация уменьшила время решения с 9.71 с до 3.69 с, то есть на 62.0%. Таким образом, профильная оптимизация оказалась существенным фактором ускорения, а не только средством диагностики. Более подробно результаты оптимизации отражены в таблице III

B. MPI-результаты

MPI-эксперименты проводились на кластере Polus ВМК МГУ [17]. В основных запусках использовались два вычислительных узла; каждый узел содержит два процессора IBM POWER8 по 10 физических ядер, каждый процесс имеет 8-ми каналную память DDR4-2400 объемом 128 GB. Задания выполнялись в режиме `pure MPI`, то есть каждый MPI-процесс запускался с одним OpenMP-потоком. Число MPI-процессов изменялось от 1 до 32, а для оптимизированной версии использовались двумерные `pencil` сетки процессов от 1×1 до 8×4 .

При малом числе процессов различие между базовой и оптимизированной версиями невелико. На 32 MPI-процессах ручная двумерная `pencil`-реализация уменьшила время решения на 13.6% по сравнению с базовым FFTW-MPI-вариантом, а ускорение относительно однопроцессного запуска увеличилось с 17.23 до 19.94. Более подробные результаты для `BiCGStab` приведены в таблице IV и на рис. 2

Для `BiCGStab( $\ell$ )` MPI-эксперименты выполнялись при $N = 96$, $\eta = 0.1$ и $\ell = 2, 3, 4$. Результаты приведены в таблице V и рис. 3.

На 32 MPI-процессах время решения для трёх значений ℓ находится в диапазоне 4.60–5.03 с. Минимальное абсолютное время в этой серии получено при $\ell = 2$. При этом значения $\ell = 3$ и $\ell = 4$ демонстрируют близкий характер масштабируемости.

C. Сходимость при малых значениях магнитной диффузии

Поскольку уменьшение η делает задачу более трудной, с точки зрения роста числа обусловленности, была проведена дополнительная серия запусков со сканированием по коэффициенту магнитной диффузии. Цель этой серии состояла не в измерении максимальной производительности, а в проверке области устойчивой сходимости.

Полученные значения следует рассматривать как экспериментальные пороговые оценки для использованной постановки задачи и параметров запуска. Тем не менее они показывают важную тенденцию: увеличение степени стабилизирующего полинома в `BiCGStab( $\ell$ )` позволяет сохранять сходимость при меньших значениях магнитной диффузии. Более подробно результаты отражены в таблице VI

D. Сравнение с *heFFTe*

Дополнительно сравнивались ручная двумерная `pencil`-реализация и два варианта на основе библиотеки *heFFTe*. Первый *heFFTe*-вариант сохранял формат спектральных буферов, близкий к ручной реализации, а второй использовал собственное выходное представление библиотеки

Таблица I
Результаты верификации при $N = 64$, $\eta = 0.1$

Показатель	BiCGStab	BiCGStab(2)
Сходимость	YES	YES
Число итераций	873	92
Максимальная ошибка вычисления оператора	$1.39 \cdot 10^{-13}$	$1.22 \cdot 10^{-13}$
Истинная невязка	$3.93 \cdot 10^{-11}$	$3.59 \cdot 10^{-10}$
Относительная ошибка в норме L_2	$1.65 \cdot 10^{-11}$	$4.16 \cdot 10^{-10}$

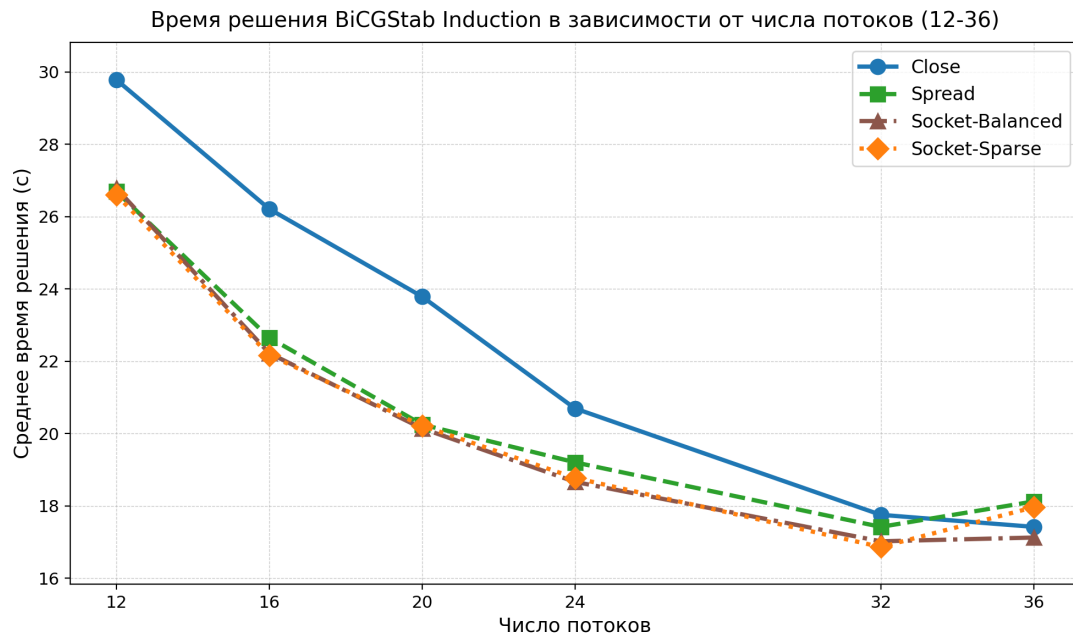


Рис. 1. Время решения OpenMP BiCGStab при различных стратегиях привязки потоков в диапазоне 12–36 потоков

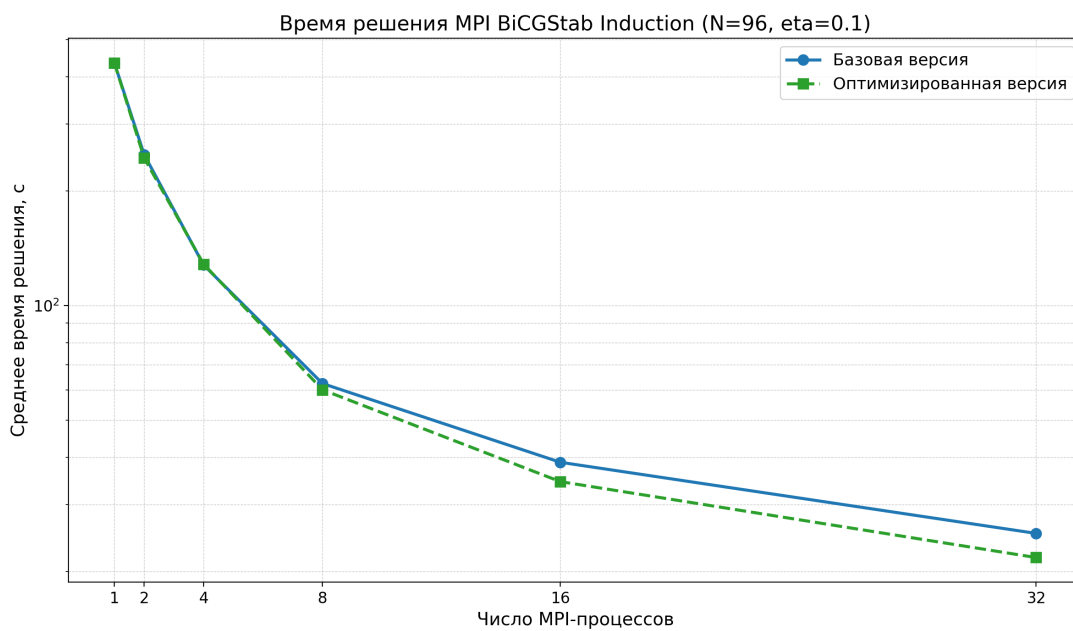


Рис. 2. Время решения MPI BiCGStab для базовой и оптимизированной реализаций

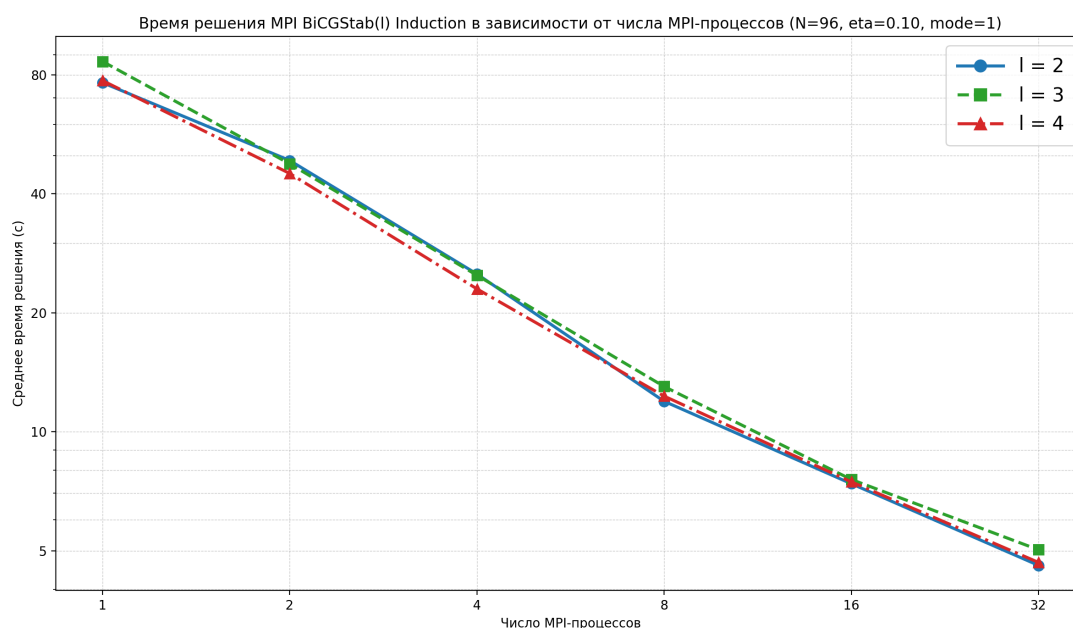
Рис. 3. Время решения MPI BiCGStab(ℓ) при $N = 96$ и $\eta = 0.1$

Таблица II
Масштабируемость OpenMP BiCGStab для стратегии
SOCKET-SPARSE-BALANCED

Потоки	Время, с	Ускорение	Эффективность, %
1	218.18	1.00	100.0
8	36.78	5.93	74.1
16	22.17	9.84	61.5
24	18.77	11.62	48.4
32	16.86	12.94	40.4
36	17.96	12.15	33.8

для спектральных данных. В обоих случаях математический метод оставался тем же; различалась только внутренняя организация данных.

Обе heFFTe-реализации завершали расчёт корректно, однако ручная 2D pencil-реализация показала меньшее абсолютное время в основной параллельной точке: 21.79 с против 24.79 с для лучшего heFFTe-варианта на 32 MPI-процессах. Более подробно результаты представлены в виде таблицы VII.

VII. Заключение

В работе представлена матрично-свободная спектральная реализация методов BiCGStab и BiCGStab(ℓ) для вспомогательных линейных задач, возникающих при исследовании магнитного α -эффекта. Основная вычислительная операция сведена к применению оператора магнитной индукции через последовательность прямых и обратных быстрых дискретных преобразований Фурье и локальных операций в физическом и спектральном пространствах. Полная матрица дискретного оператора при этом не строится.

В отличие от работы [3], где основное внимание уделяется физической задаче генерации магнитного поля, в настоящей работе акцент сделан на вычислительной стороне: матрично-свободном применении оператора, устойчивости итерационных методов и параллельной организации БПФ.

Верификация на аналитической тестовой задаче показала ошибку применения оператора порядка 10^{-13} и малую истинную невязку полученных решений. OpenMP-эксперименты на одном узле ЦХАБД показали ускорение BiCGStab до 12.94 при 32 потоках. Для BiCGStab(ℓ) оптимизация, основанная на результатах VTune, уменьшила время решения при 32 потоках на 62.0%.

MPI-эксперименты на кластере Polus показали, что ручное 2D pencil-разложение становится выгодным при увеличении числа процессов: на 32 MPI-процессах время BiCGStab уменьшилось на 13.6% по сравнению с базовым FFTW-MPI-вариантом. Для MPI BiCGStab(ℓ) при $\ell = 2$ было получено время 4.60 с на 32 процессах и ускорение 16.63. Сканирование по магнитной диффузии показало, что увеличение ℓ расширяет область устойчивой сходимости: в рассматриваемой серии минимальное рабочее значение η изменялось примерно от 0.10 для BiCGStab до 0.04 для BiCGStab(4).

Полученные результаты показывают, что сочетание матрично-свободной спектральной реализации, предобусловленных методов BiCGStab/BiCGStab(ℓ) и явной настройки параллельной организации вычислений позволяет эффективно решать трёхмерные вспомогательные задачи магнитной индукции на многоядерных и распределённых вычислительных системах.

Список литературы

- [1] Moffatt H. K. Magnetic Field Generation in Electrically Conducting Fluids. — Cambridge : Cambridge University Press, 1978.
- [2] Krause F., Rädler K.-H. Mean-Field Magnetohydrodynamics and Dynamo Theory. — Oxford : Pergamon Press, 1980. — ISBN: 978-0-08-025041-0.
- [3] Rasskazov Andrey, Chertovskih Roman, Zheligovsky Vladislav. Magnetic field generation by pointwise zero-helicity three-dimensional steady flow of an incompressible electrically conducting fluid // Physical Review E. — 2018. — Vol. 97, no. 4. — P. 043201.
- [4] Spectral Methods: Fundamentals in Single Domains / Claudio Canuto, M. Youssuff Hussaini, Alfio Quarteroni, Thomas A. Zang. Scientific Computation. — Berlin, Heidelberg : Springer, 2006.
- [5] Trefethen Lloyd N. Spectral Methods in MATLAB. — Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000. — ISBN: 978-0-89871-465-4.

Таблица III
Влияние оптимизации на OpenMP BiCGStab(ℓ) при $\ell = 2$

Потоки	До оптимизации, с	После оптимизации, с	Ускорение после оптимизации	Снижение времени, %
1	54.42	42.48	1.00	21.9
8	13.74	7.23	5.88	47.4
16	10.65	4.69	9.05	55.9
24	10.30	4.32	9.83	58.0
32	9.71	3.69	11.51	62.0
36	10.56	3.97	10.70	62.4

Таблица IV
Сравнение базовой и оптимизированной MPI-реализаций BiCGStab при $N = 96$, $\eta = 0.1$

Процессы	$T_{\text{баз.}}$, с	$T_{\text{опт.}}$, с	$S_{\text{баз.}}$	$S_{\text{опт.}}$	$T_{\text{баз.}}/T_{\text{опт.}}$
1	434.74	434.65	1.00	1.00	1.00
2	249.66	244.62	1.74	1.78	1.02
4	127.95	128.66	3.40	3.38	0.99
8	62.45	60.13	6.96	7.23	1.04
16	38.79	34.50	11.21	12.60	1.12
32	25.23	21.79	17.23	19.94	1.16

Таблица V
MPI BiCGStab(ℓ) при $N = 96$, $\eta = 0.1$

Процессы	$\ell = 2$		$\ell = 3$		$\ell = 4$	
	T_p , с	S_p	T_p , с	S_p	T_p , с	S_p
1	76.43	1.00	86.50	1.00	77.38	1.00
2	48.58	1.57	47.65	1.82	45.04	1.72
4	25.08	3.05	24.89	3.47	23.00	3.36
8	11.95	6.40	13.03	6.64	12.32	6.28
16	7.40	10.34	7.58	11.41	7.48	10.35
32	4.60	16.63	5.03	17.19	4.68	16.55

Таблица VI
Минимальные значения η , при которых наблюдалась устойчивая сходимость

Метод	Минимальное η
BiCGStab	$\eta \approx 0.10$
BiCGStab(2)	$\eta \approx 0.08$
BiCGStab(3)	$\eta \approx 0.06$
BiCGStab(4)	$\eta \approx 0.04$

- [6] Saad Yousef. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. — 2 edition. — Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003. — ISBN: 978-0-89871-534-7.
- [7] Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods / Richard Barrett, Michael Berry, Tony F. Chan et al. — Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1994.
- [8] van der Vorst Henk A. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems // SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing. — 1992. — Vol. 13, no. 2. — P. 631–644.
- [9] Sleijpen Gerard L. G., Fokkema Diederik R. BiCGstab(ℓ) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum // Electronic Transactions on Numerical Analysis. — 1993. — Vol. 1. — P. 11–32.
- [10] Frigo Matteo, Johnson Steven G. The design and implementation of FFTW3 // Proceedings of the IEEE. — 2005. — Vol. 93, no. 2. — P. 216–231.
- [11] Pekurovsky Dmitry. P3DFFT: A framework for parallel computations of fourier transforms in three dimensions // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2012. — Vol. 34, no. 4. — P. C192–C209.
- [12] Li Ning, Laizet Sylvain. 2DECOMP&FFT: A highly scalable 2D decomposition library and FFT interface // Proceedings of the Cray User Group 2010 Conference. — Edinburgh, 2010.
- [13] heFFTe: Highly efficient FFT for exascale / Alan Ayala, Stanimire Tomov, Azzam Haidar, Jack Dongarra // Computational Science – ICCS 2020. — Vol. 12137 of Lecture Notes in Computer Science. — Springer, 2020. — P. 262–275.
- [14] OpenMP Architecture Review Board. OpenMP application programming interface, version 6.0. — <https://www.openmp.org/wp-content/uploads/OpenMP-API-Specification-6-0.pdf>. — 2024. — Accessed: 2026-04-28.
- [15] Message Passing Interface Forum. MPI: A message-passing interface standard, version 5.0. — <https://www.mpi-forum.org/docs/mpi-5.0/mpi50-report.pdf>. — 2025. — Accessed: 2026-04-28.
- [16] Intel Corporation. Intel VTune Profiler User Guide. — <https://www.intel.com/content/www/us/en/docs/vtune-profiler/user-guide/current/overview.html>. — 2025. — Accessed: 2026-04-28.
- [17] БМК МГУ. Описание вычислительного комплекса IBM Polus. — <https://hpc.cs.msu.ru/polus>. — 2026. — Дата обращения: 2026-05-04.

Таблица VII
Сравнение ручной двумерной pencil-реализации и heFFTe-вариантов для MPI BiCGStab

Реализация	T_1 , с	T_{32} , с	S_{32}
Ручная двумерная pencil-реализация	434.65	21.79	19.94
heFFTe с буферами в формате ручной 2D-реализации	601.56	25.48	23.61
heFFTe с собственным спектральным представлением библиотеки	473.41	24.79	19.10

Matrix-Free Spectral Implementation and Parallel Acceleration of BiCGStab and BiCGStab(ℓ) Methods for the Magnetic Induction Problem

K. A. Zhukov, X. Zhang

Abstract—The paper studies parallel implementations of the BiCGStab and BiCGStab(ℓ) iterative methods for auxiliary linear problems arising in the computation of the magnetic α -effect. The magnetic induction equation is considered in a three-dimensional periodic domain. After spectral discretization, the problem leads to large nonsymmetric systems of linear algebraic equations whose full matrix is not assembled. The proposed implementation is based on a matrix-free application of the magnetic induction operator, FFT-based transitions between physical and spectral spaces, preconditioned Krylov subspace methods, and OpenMP/MPI parallelization. Numerical experiments for a grid with $N = 96$ show that the OpenMP BiCGStab implementation reduces the solution time by a factor of 13 with 32 threads. Optimization of the OpenMP BiCGStab(ℓ) implementation reduces the solution time at 32 threads by 62.0%. The MPI BiCGStab implementation with a manual 2D pencil decomposition reduces the solution time at 32 processes by 13.6% compared with the baseline FFTW-MPI implementation. Additional scans over the magnetic diffusivity show that increasing the polynomial degree ℓ extends the range of stable convergence for smaller values of η .

Keywords—magnetic induction, magnetic alpha-effect, BiCGStab, BiCGStab(ℓ), matrix-free method, spectral method, FFT, OpenMP, MPI, 2D pencil decomposition, heFFTe

References

- 1) Moffatt H. K. Magnetic Field Generation in Electrically Conducting Fluids. Cambridge: Cambridge University Press, 1978.
- 2) Krause F., Rädler K.-H. Mean-Field Magnetohydrodynamics and Dynamo Theory. Oxford: Pergamon Press, 1980.
- 3) Rasskazov A., Chertovskih R., Zheligovsky V. Magnetic field generation by pointwise zero-helicity three-dimensional steady flow of an incompressible electrically conducting fluid. *Physical Review E*, 2018, vol. 97, no. 4, 043201.
- 4) Canuto C., Hussaini M. Y., Quarteroni A., Zang T. A. Spectral Methods: Fundamentals in Single Domains. Berlin, Heidelberg: Springer, 2006.
- 5) Trefethen L. N. Spectral Methods in MATLAB. Philadelphia: SIAM, 2000.
- 6) Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. 2nd ed. Philadelphia: SIAM, 2003.
- 7) Barrett R., Berry M., Chan T. F., Demmel J., Donato J., Dongarra J., Eijkhout V., Pozo R., Romine C., van der Vorst H. Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods. Philadelphia: SIAM, 1994.
- 8) van der Vorst H. A. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 1992, vol. 13, no. 2, pp. 631–644.
- 9) Sleijpen G. L. G., Fokkema D. R. BiCGstab(ℓ) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 1993, vol. 1, pp. 11–32.
- 10) Frigo M., Johnson S. G. The design and implementation of FFTW3. *Proceedings of the IEEE*, 2005, vol. 93, no. 2, pp. 216–231.
- 11) Pekurovsky D. P3DFFT: a framework for parallel computations of Fourier transforms in three dimensions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2012, vol. 34, no. 4, pp. C192–C209.
- 12) Li N., Laizet S. 2DECOMP&FFT: a highly scalable 2D decomposition library and FFT interface. *Cray User Group 2010 Conference*, Edinburgh, 2010.
- 13) Ayala A., Tomov S., Haidar A., Dongarra J. heFFTe: Highly efficient FFT for exascale. *Computational Science – ICCS 2020. Lecture Notes in Computer Science*, 2020, vol. 12137, pp. 262–275.
- 14) OpenMP Architecture Review Board. OpenMP Application Programming Interface, Version 6.0, 2024.
- 15) Message Passing Interface Forum. MPI: A Message-Passing Interface Standard, Version 5.0, 2025.
- 16) Intel Corporation. Intel VTune Profiler User Guide, 2025.
- 17) Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics, Lomonosov Moscow State University. Description of the IBM Polus computing system. Available at: <https://hpc.cs.msu.ru/polus> (accessed 04.05.2026).