

УДК 519.688

**ПОСТРОЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО ПАРАЛЛЕЛЬНОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ
УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭВОЛЮЦИИ
ПРОТОПЛАНЕТНОГО ДИСКА**

В. А. Вшивков¹, А. В. Снытников¹

Представлен метод решения уравнения Пуассона, построенный с помощью учета особенностей решаемой задачи. Нестационарный характер задачи позволяет быстро решать уравнение Пуассона с помощью простых итерационных алгоритмов. Учет осевой симметрии диска дает возможность построения декомпозиции расчетной области, значительно сокращающей объем межпроцессорных коммуникаций. Наконец, приближение бесконечно тонкого диска позволяет дополнительно ускорить счет при использовании итерационных методов. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 08-01-615 и 08-01-622), а также интеграционных проектов СО РАН № 103 и № 113. Статья подготовлена по материалам доклада авторов на международной конференции “Параллельные вычислительные технологии” (ПаВТ-2009; <http://agora.guru.ru/pavt2009>).

Ключевые слова: уравнение Пуассона, нестационарные задачи, итерационные методы, протопланетный диск.

1. Введение.

1.1. Постановка задачи. Эволюция пылевой компоненты газопылевого протопланетного диска, вращающегося в гравитационном поле некоторой звезды, описывается системой уравнений звездной динамики, состоящей из уравнений Власова–Лиувилля и Пуассона:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} = 0, \quad \Delta \Phi = 4\pi\gamma\rho, \quad (1)$$

где $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{u})$ — функция распределения частиц пыли по скоростям, \mathbf{a} — ускорение частиц, которое определяется формулой $\mathbf{a} = -\nabla\Phi$, ρ — объемная плотность вещества (сумма плотности газа и частиц), Φ — гравитационный потенциал и γ — гравитационная постоянная. Эта система дополняется уравнениями газовой динамики, описывающими движение газовой компоненты протопланетного диска [1]. Частицы и газ движутся в трех измерениях, но при изучении эволюции протопланетного диска предполагается наличие центрального тела с массой, на порядок большей массы диска. В этом случае движение может считаться двумерным, а сам диск бесконечно тонким, так что объемная плотность ρ в правой части уравнения Пуассона принимается равной нулю. Плотность вещества σ в плоскости диска используется в граничных условиях. Уравнение Пуассона, тем не менее, является строго трехмерным.

Задача моделирования эволюции протопланетного диска является нестационарной. Система уравнений (1) решается на каждом временном шаге. Уравнение Власова–Лиувилля решается методом частиц-в-ячейках, что дает координаты модельных частиц и плотность вещества, а затем решается уравнение Пуассона для определения гравитационного потенциала. Метод решения уравнения Пуассона является основной темой настоящей статьи.

Выбор системы координат, в которой будут решаться уравнения Власова–Лиувилля и Пуассона, обусловлен следующими соображениями. Основное направление движения вещества в протопланетном диске — круговое, поэтому желательно, чтобы система координат обеспечивала инвариантность относительно поворота вокруг центральной точки (звезды или протозвезды). Кроме того, желательно избежать появления нефизических крестообразных структур, которые ранее были получены при моделировании галактических дисков в декартовых координатах [2].

В отношении размера сетки для решения уравнений Власова–Лиувилля и Пуассона можно привести следующую оценку. При изучении эволюции Солнечной системы наиболее интересна область, находящаяся

¹ Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, просп. акад. М. А. Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск; В. А. Вшивков, зав. лаб., e-mail: vsh@ssd.sccc.ru; А. В. Снытников, науч. сотр., e-mail: snytav@ssd.sccc.ru

внутри орбиты Марса, которая в 50 раз меньше размера всей Солнечной системы (если принять за таковой радиус орбиты Плутона). Если взять по длине орбиты Марса 10 узлов сетки, что минимально необходимо, то размер сетки по радиальной координате составляет 500 узлов. Таким образом, исходя из того, что шаги сетки по всем трем координатам должны быть примерно равными, заключаем, что трехмерная сетка содержит примерно 500^3 узлов.

При решении уравнения Власова–Лиувилля методом частиц уровень нефизических шумов оценивается как $N^{-1/2}$, где N — число частиц в ячейке сетки (100 частиц в ячейке дают 10% шумов). Таким образом, из приведенной оценки размера сетки следует, что минимально необходимо 25 миллионов частиц (по 100 частиц на ячейку сетки в плоскости диска). Однако для исследования гравитационных неустойчивостей в протопланетном диске уровень шумов в 10% является недопустимо большим. Тем самым необходимо проводить расчеты с сотнями миллионов частиц, что означает необходимость использования суперЭВМ.

В результате приходим к следующим требованиям на методы решения уравнений Пуассона и Власова–Лиувилля: решение следует искать в цилиндрической системе координат; необходимо решать задачи большой размерности за приемлемое время; требуется обеспечить эффективное распараллеливание.

1.2. Выбор метода решения уравнения Пуассона. Итак, в задаче моделирования эволюции протопланетного диска область решения имеет вид кругового цилиндра $0 \leq r \leq R_M$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $0 \leq z \leq Z_M$, при этом диск считается бесконечно тонким и находится на нижней грани цилиндра $z = 0$. Уравнение Пуассона решается на каждом временном шаге процесса моделирования. Система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), которая получается при дискретизации уравнения Пуассона, является плохо обусловленной. Таким образом, возникает задача решения трехмерной плохо обусловленной СЛАУ большого размера, что требует разработки параллельных численных методов.

В книге [3] приведена таблица, показывающая, что итерационные методы — сопряженных градиентов или верхней релаксации — работают медленнее (сложность $O(N^{3/2})$, где N — число неизвестных), чем прямые — метод преобразования Фурье или блочная циклическая редукция (сложность $O(N \log N)$). Тем не менее, итерационные методы обладают важным с точки зрения решаемой задачи достоинством. Дело в том, что они работают намного быстрее при наличии близкого к решению начального приближения. В задаче моделирования эволюции протопланетного диска уравнение Пуассона решается на каждом временном шаге, поэтому целесообразно использовать наиболее простые итерационные методы, например метод последовательной верхней релаксации (ПВР), которые способны учитывать решение, полученное на предыдущем временном шаге.

Уравнение Пуассона в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = 4\pi\gamma\rho.$$

В случае бесконечно тонкого диска правая часть уравнения Пуассона заменяется на $\delta(z)\sigma(r, \varphi)$, где $\delta(z)$ — дельта-функция Дирака и $\sigma(r, \varphi)$ — поверхностная плотность. Уравнение Пуассона с нулевой правой частью называется уравнением Лапласа, но далее будет по-прежнему использоваться формулировка “уравнение Пуассона”, так как реализованные численные методы в основном могут быть использованы и для уравнения Пуассона с ненулевой правой частью. На поверхности диска существует разрыв нормальной производной потенциала:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_{z \rightarrow +0} - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_{z \rightarrow -0} = 2\pi\gamma\sigma. \tag{2}$$

Таким образом, появляется граничное условие на производную потенциала на поверхности диска $z = 0$. Граничные условия при $r = R_M$ и $z = Z_M$ могут быть заданы произвольно так, чтобы обеспечить необходимую точность решения при минимальном времени счета, например вычисляя потенциал при $r = R_M$ и $z = Z_M$ с помощью приближенного вычисления интеграла

$$\Phi(\mathbf{r}_0) = \int_S \frac{\sigma dS}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}|}. \tag{3}$$

Граничные условия при $r = R_M$ и $z = Z_M$ задаются один раз в начале расчета (момент времени $t = 0$). По координате φ задаются периодические граничные условия.

1.3. Аппроксимация уравнения Пуассона. Пусть N_R , N_φ , N_Z — число узлов по радиальной, угловой и z -координате соответственно. Тогда для $i = 1, \dots, N_R - 1$, $k = 1, \dots, N_\varphi$, $l = 2, \dots, N_Z - 1$

аппроксимация уравнения Пуассона на равномерной сетке в цилиндрической системе координат может быть построена, например, следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_r^2} \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} \Phi_{i-3/2, k-1/2, l} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} \Phi_{i+1/2, k-1/2, l} \right] + \\ & + \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \left[\Phi_{i-1/2, k-3/2, l} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \Phi_{i-1/2, k+1/2, l} \right] + \\ & + \frac{1}{h_z^2} \left[\Phi_{i-1/2, k-1/2, l-1} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \Phi_{i-1/2, k-1/2, l+1} \right] = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

В плоскости диска вторая производная потенциала по направлению z не существует. Тем не менее, с учетом граничного условия (2) для узлов сетки, находящихся в плоскости диска $z = 0$, может быть получено аналогичное уравнение:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_r^2} \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} \Phi_{i-3/2, k-1/2, 1} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, 1} + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} \Phi_{i+1/2, k-1/2, 1} \right] + \\ & + \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \left[\Phi_{i-1/2, k-3/2, 1} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, 1} + \Phi_{i-1/2, k+1/2, 1} \right] + \\ & + \frac{2}{h_z^2} \left[\Phi_{i-1/2, k-1/2, 2} - \Phi_{i-1/2, k-1/2, 1} \right] = \sigma_{i-1/2, k-1/2}, \quad i = 1, \dots, N_R - 1, \quad k = 1, \dots, N_\varphi. \end{aligned} \quad (5)$$

Имеем $\Phi_{i-1/2, N_\varphi+1/2, l} = \Phi_{i-1/2, 1/2, l}$ и $\Phi_{i-1/2, -1/2, l} = \Phi_{i-1/2, N_\varphi-1/2, l}$, поскольку граничные условия периодичны.

2. Решение уравнения Пуассона.

2.1. Использование метода последовательной верхней релаксации. Метод последовательной верхней релаксации не является наиболее быстрым методом решения СЛАУ. Однако этот метод очень прост и потому хорошо поддается различным модификациям, ускоряющим его работу. Более того, при решении задачи об эволюции протопланетного диска метод ПВР может быть эффективнее, чем, как считается, более быстрые методы, такие как преобразование Фурье или циклическая редукция.

Дело в том, что метод ПВР работает намного быстрее при наличии близкого к решению начального приближения (в рассматриваемой задаче это две или три, максимум 10 итераций). В задаче моделирования эволюции протопланетного диска уравнение Пуассона решается на каждом временном шаге. Поэтому целесообразно использовать итерационные методы, которые способны учитывать решение, полученное на предыдущем временном шаге. Более быстрые итерационные методы, такие как GMRES или многосеточный метод, делают меньше итераций, но из-за большей сложности отдельной итерации время оказывается больше.

2.1.1. Метод ПВР для трехмерного уравнения Пуассона. Система линейных алгебраических уравнений (4), (5) решается методом последовательной верхней релаксации с применением циклической прогонки, для чего уравнения переписываются в следующем виде:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \hat{\Phi}_{i-1/2, k-3/2, l} + \frac{2}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \hat{\Phi}_{i-1/2, k-1/2, l} - \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \hat{\Phi}_{i-1/2, k+1/2, l} = \\ & = \frac{1}{h_r^2} \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} \Phi_{i-3/2, k-1/2, l} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} \Phi_{i+1/2, k-1/2, l} \right] + \\ & + \frac{1}{h_z^2} \left[\Phi_{i-1/2, k-1/2, l-1} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \Phi_{i-1/2, k-1/2, l+1} \right] - \rho_{i-1/2, k-1/2, l}, \\ & i = 1, \dots, N_R - 1, \quad k = 1, \dots, N_\varphi, \quad l = 1, \dots, N_Z - 1, \\ & \Phi_{i-1/2, k-1/2, l}^n(m) = \omega \hat{\Phi}_{i-1/2, k-1/2, l}^n(m) + (1 - \omega) \Phi_{i-1/2, k-1/2, l}^{n-1}(m). \end{aligned}$$

Здесь значения

$$\rho_{i-1/2, k-1/2, l} = \begin{cases} \sigma_{i-1/2, k-1/2}, & l = 0, \\ 0, & j = 1, \dots, N_Z - 1 \end{cases}$$

вычисляются при $i = 2, \dots, N_R - 1$, $k = 2, \dots, N_\varphi - 1$ и $l = 1, \dots, N_Z - 1$, а ω — параметр релаксации.

Для вычисления оптимального значения параметра релаксации ω известна формула $\omega_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}}$ (см. [4, 5]), где μ — коэффициент подавления ошибки метода Якоби.

2.1.2. Радиальная декомпозиция области. Основное направление движения частиц в рассматриваемой задаче — угловое, и при разделении области по угловой координате на каждом шаге потребовалось бы пересылать большое количество частиц. Заполнение области частицами в радиальном направлении изначально неравномерное, а вблизи границ области частиц вовсе не может быть — это потребовало бы пересчета граничных условий на каждом шаге. Таким образом, равномерное распределение загрузки процессоров при радиальной декомпозиции области невозможно.

Поэтому частицы распределяются по процессорам равномерно, без учета их положения в пространстве. В пользу этого варианта говорит и то, что для расчета движения частиц необходимо знание потенциала не во всей области решения уравнения Пуассона, а только в одной плоскости. Это возможно в силу того, что моделируемая физическая система считается плоской. Такой способ распараллеливания метода частиц облегчает выбор метода для решения уравнения Пуассона, так как трехмерная область для потенциала может быть разбита на подобласти для размещения в процессорном элементе (ПЭ) произвольным образом. Образующиеся подобласти не связываются с распределением частиц по ПЭ.

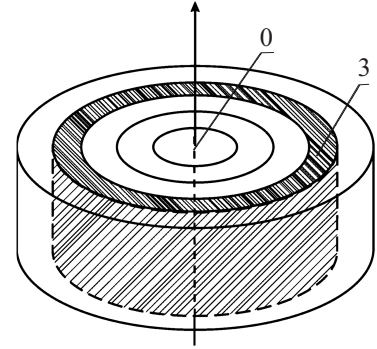


Рис. 1. Радиальная декомпозиция расчетной области для решения уравнения Пуассона методом ПВР

Для решения уравнения Пуассона область решения разделена на слои по радиусу для того, чтобы по возможности выравнить количество итераций при решении уравнения Пуассона в каждом ПЭ и использовать метод циклической прогонки в угловом направлении. Рис. 1 показывает разделение цилиндрической области между пятью процессорами. Такой вариант распараллеливания решения уравнения Пуассона требует обмена граничными условиями между соседними процессорами на каждой итерации. При относительно небольшой скорости межпроцессорного обмена на кластерах в результате получается небольшое ускорение при распараллеливании (в два раза на трех процессорах и в 2.5 раза на шести процессорах). Более того, необходима высокая скорость при обращении к оперативной памяти для работы с трехмерной матрицей потенциала, что приводит к значительному замедлению при работе на ЭВМ с общей памятью.

2.2. Переход от трехмерной СЛАУ к набору двумерных систем.

2.2.1. Преобразование Фурье. Для того чтобы избавиться от межпроцессорных коммуникаций на каждой итерации, было выполнено преобразование Фурье по угловой координате. В результате получается набор систем линейных алгебраических уравнений для фурье-гармоник потенциала:

$$\frac{1}{h_r^2} \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} H_{i-3/2,l}(m) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} H_{i+1/2,l}(m) \right] + \frac{1}{h_z^2} \left[d_l H_{i-1/2,l-1}(m) + u_l H_{i-1/2,l+1}(m) \right] - \left[\frac{2}{h_z^2} + \frac{2}{h_r^2} + 4 \sin^2 \frac{\pi m}{N_\varphi} \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \right] H_{i-1/2,l}(m) = R_{i-1/2,l}(m), \tag{6}$$

$$i = 1, \dots, N_R - 1, \quad m = 0, \dots, N_\varphi - 1, \quad l = 1, \dots, N_Z - 1.$$

Полученные линейные системы для фурье-гармоник потенциала полностью независимы друг от друга. Таким образом, возникает естественная возможность распараллеливания решения уравнения Пуассона путем декомпозиции области по угловым волновым числам m , при этом полностью исключаются коммуникации между процессорами на этапе решения СЛАУ. После вычисления каждой из гармоник значения $l = 0$ собираются в один процессор для выполнения обратного преобразования Фурье.

2.2.2. Свойства матрицы двумерной СЛАУ. Рассмотрим строку матрицы системы линейных уравнений для фурье-гармоники с волновым числом m :

$$A_{i,l}(m) = \left\{ \frac{1}{h_z^2}, 0, \dots, 0, \frac{1}{h_r^2} \frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}}, -2 \left(\frac{1}{h_z^2} + \frac{1}{h_r^2} + 2 \sin^2 \frac{\pi m}{N_\varphi} \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \right), \frac{1}{h_r^2} \frac{r_i}{r_{i-1/2}}, 0, \dots, 0, \frac{1}{h_z^2} \right\}.$$

Эта матрица является пятидиагональной. Видно, что для $m = 0$ диагональный элемент матрицы A равен сумме недиагональных, т.е. диагональное преобладание очень слабо выражено. Далее с увеличением m диагональный элемент растет.

Таким образом, для коротковолновых гармоник (с большим значением m) имеется выраженное диагональное преобладание, в то время как для длинноволновых гармоник диагональное преобладание слабое. Это приводит к медленной сходимости при решении СЛАУ для нулевой гармоники итерационными методами или к потере точности или даже численной неустойчивости при использовании прямых методов.

На рис. 2 показано число итераций метода ПВР для различных фурье-гармоник. Число итераций для нулевой гармоники превосходит 500. Пунктирной линией показано условное число итераций, соответствующее времени счета гармоники с помощью метода преобразования Фурье (вычисление одной гармоники с помощью метода преобразования Фурье происходит за 0.11 с, среднее время выполнения одной итерации метода ПВР — 0.035 с). Дробное число итераций связано с тем, что итерации по координате z с целью ускорения счета проводились не во всем интервале $l = 1, \dots, N_Z$. Размер сетки для отдельной гармоники составляет $N_R \times N_Z = 500 \times 512$, расчет проведен на процессоре Itanium2.

2.2.3. Расчет фурье-гармоники методом ПВР. Метод последовательной верхней релаксации был реализован в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{i-1/2,l}^n(m) &= \left[\frac{2}{h_z^2} + \frac{2}{h_r^2} + \frac{4}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \sin^2 \frac{\pi m}{N_\varphi} \right]^{-1} \times \\ &\times \left\{ -R_{i-1/2,l}(m) + \frac{1}{h_r^2} \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} H_{i-3/2,l}^n(m) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} H_{i+1/2,l}^{n-1}(m) \right] + \right. \\ &\left. + \frac{1}{h_z^2} \left[d_l H_{i-1/2,l-1}^n + u_l H_{i-1/2,l+1}^{n-1} \right] \right\}, \\ H_{i-1/2,l}^n(m) &= \omega \hat{H}_{i-1/2,l}^n(m) + (1 - \omega) H_{i-1/2,l}^{n-1}(m), \\ i &= 2, \dots, N_R - 1, \quad m = 0, \dots, N_\varphi - 1, \quad l = 1, \dots, N_Z - 1. \end{aligned}$$

Здесь ω — параметр релаксации. Для приведенных расчетов использовано подобранное приближенное значение $\omega_0 = 1.83$.

Для метода ПВР число итераций зависит от номера гармоники (см. рис. 2). Итерации прекращались при невязке $\varepsilon < 10^{-6}$, $\varepsilon = \max_{i,k,l} |\Phi_{i-1/2,k+1/2,l}^n - \Phi_{i-1/2,k+1/2,l}^{n+1}|$. Дальнейшее ее уменьшение нецелесообразно, так как граничные условия для уравнения Пуассона (поверхностная плотность вещества σ) вычисляются с меньшей точностью.

Когда итерационный процесс был уже близок к сходимости ($\varepsilon \sim 10^{-4}$), итерации по координате z с целью ускорения счета проводились не во всем интервале $l = 1, \dots, N_Z$. Если для слоя l_0 по z -координате условие сходимости $\max_{i,k} |\Phi_{i,k,l_0}^n - \Phi_{i,k,l_0}^{n+1}| < 10^{-6}$ выполнено, то слои с $l > l_0$ не рассматривались. Это возможно, так как с течением времени изменяется граничное условие только на нижней грани цилиндра ($l = 1$). Число итераций, таким образом, получается делением числа всех пройденных в ходе итерационного процесса слоев по z -координате на N_Z и может оказаться дробным (рис. 2).

Как видно из рис. 2, для некоторых гармоник потенциала метод ПВР работает быстрее, чем метод преобразования Фурье. Это объясняется наличием близкого к решению начального итерационного приближения. В качестве такого приближения использовалось решение, полученное на предыдущем временном шаге. Предполагается, что в течение одного временного шага плотность, а значит, и потенциал, изменяются незначительно. Это, естественно, не означает, что итерационный метод ПВР работает быстрее и лучше прямого (преобразование Фурье) в общем случае.

Число итераций для нулевой гармоники более 500, поэтому эта гармоника на рис. 2 не показана. Таким образом, именно нулевая гармоника дает основной вклад в нагрузку вычислительной системы при расчете всех гармоник методом ПВР. Важно отметить, что такое распределение нагрузки по гармоникам является особенностью СЛАУ (плохо обусловленная матрица), а не используемых численных методов. По

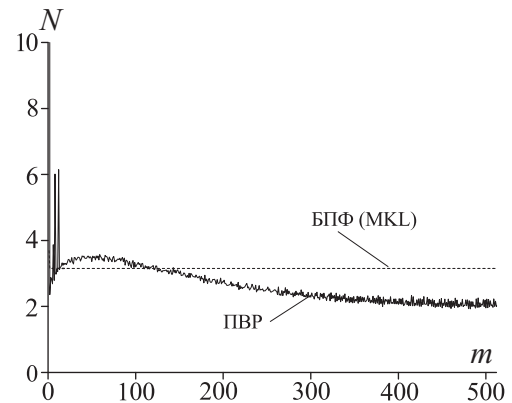


Рис. 2. Число итераций метода ПВР в зависимости от волнового числа ($N_\varphi = 512$) в том случае, когда имеется близкое к решению начальное итерационное приближение

этой причине распараллеливание решения уравнения Пуассона при расчете всех гармоник методом ПВР оказывается затруднительным (процессор, содержащий гармонику $m = 0$, всегда оказывается перегруженным по сравнению с другими процессорами). Эту проблему удастся решить с помощью вычисления нулевой гармоники методом преобразования Фурье.

2.3. Вычисление отдельных гармоник потенциала методом преобразования Фурье.

2.3.1. Реализация метода преобразования Фурье. Так как метод преобразования Фурье имеет меньшую сложность, чем метод ПВР ($N \log N$ против $N^{3/2}$), то было бы естественным попытаться использовать метод преобразования Фурье для расчета тех гармоник потенциала, для расчета которых необходимо большое количество итераций (длинноволновые гармоники $m = 0, 1, 2$, как на рис. 2).

Как упоминалось выше, на нижней грани $z = 0$ цилиндрической расчетной области задается граничное условие на производную потенциала, а на верхней грани $z = z_M$ — на сам потенциал. В результате по координате z возникает краевая задача третьего рода. Численное решение такой краевой задачи методом преобразования Фурье требует конструирования специальной системы собственных функций, как указано в [6], поэтому для метода преобразования Фурье краевое условие первого рода на верхней грани цилиндра $z = Z_M$ было заменено на краевое условие Неймана. Таким образом, получаем краевую задачу второго рода со стандартной системой собственных функций.

Был выбран наиболее простой метод расчета граничного условия на поверхности $z = Z_M$. Потенциал вычислялся с помощью интеграла (3) на поверхностях $z = Z_M$ и $z = Z_M - h_z$. Далее граничное условие на производную потенциала на поверхности $z = Z_M$ вычисляется численным дифференцированием.

Реализация метода преобразования Фурье для решения уравнения с переменными по r коэффициентами была выполнена следующим образом. Проводилось разложение в однократный ряд Фурье по координате z : $F_{i-1/2}(m, k) = \sum_{j=0}^{N_Z-1} H_{i-1/2,j}(m) p_j \cos\left(\frac{\pi k j}{N_Z}\right)$, $Q_{i-1/2}(m, k) = \sum_{j=0}^{N_Z-1} R_{i-1/2,j}(m) p_j \cos\left(\frac{\pi k j}{N_Z}\right)$, $i = 2, \dots, N_R - 1$, $p_j = 0.5$ при $j = 0, N_Z - 1$, $p_j = 1$ при $j = 1, \dots, N_Z - 2$.

Таким образом, СЛАУ для каждой угловой фурье-гармоники с номером m (6) заменяется на систему из $N_\varphi \times N_Z$ независимых друг от друга трехдиагональных линейных систем:

$$\frac{1}{h_r^2} \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} F_{i-3/2}(m, k) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} F_{i+1/2}(m, k) \right] - \left[\frac{2}{h_r^2} + 4 \sin^2 \frac{\pi m}{N_\varphi} \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} + \frac{4}{h_z^2} \sin^2 \frac{\pi k}{2N_Z} \right] F_{i-1/2}(m, k) = Q_{i-1/2}(m, k),$$

$$i = 2, \dots, N_R - 1, \quad m = 0, \dots, N_\varphi - 1, \quad k = 1, \dots, N_Z - 1.$$

Полученные трехдиагональные СЛАУ решаются методом прогонки [4].

2.3.2. Влияние оптимизации преобразования Фурье под архитектуру процессора. Было проведено сравнение времени расчета одной гармоники потенциала с помощью метода преобразования Фурье и с помощью метода ПВР в том случае, когда информация о решении полностью отсутствует (рис. 3). Тогда метод ПВР работает очень долго; в частности, для сетки $N_R \times N_Z = 500 \times 512$ делается более 8000 итераций. В таком случае метод преобразования Фурье дает решение на четыре порядка быстрее (569 секунд для метода ПВР и 0.11 секунды для метода преобразования Фурье), как видно из рис. 3.

Для сравнения были использованы функции быстрого преобразования Фурье из библиотек NAG [7] и MKL [8]. Расчеты проводились на рабочей станции с процессором Itanium2 для двумерной сетки $N_R \times N_Z = 500 \times 512$. Из рис. 3 видно, что при помощи процедуры из библиотеки MKL решение происходит быстрее, чем с использованием процедуры из библиотеки NAG.

Разница во времени счета может объясняться оптимизацией библиотеки MKL под архитектуру процессора Itanium2. Процедура FFTC библиотеки NAG, осуществляющая быстрое преобразование Фурье, была использована в виде исходного текста на языке Фортран, а не в виде откомпилированных двоичных кодов, как это было в случае библиотеки MKL.

Тем не менее, основное преимущество (три порядка для сетки $N_R \times N_Z = 500 \times 512$) получено именно за счет метода преобразования Фурье (метод ПВР в сравнении с методом преобразования Фурье с использованием библиотеки NAG), и затем еще один порядок получается за счет оптимизации под конкретную архитектуру (метод преобразования Фурье с использованием библиотеки NAG по сравнению с библиотекой MKL).

3. Ускорение параллельной программы. Время расчета нулевой гармоники потенциала методом преобразования Фурье сокращается в 10000 раз. Таким образом, нулевая гармоника более не вызывает

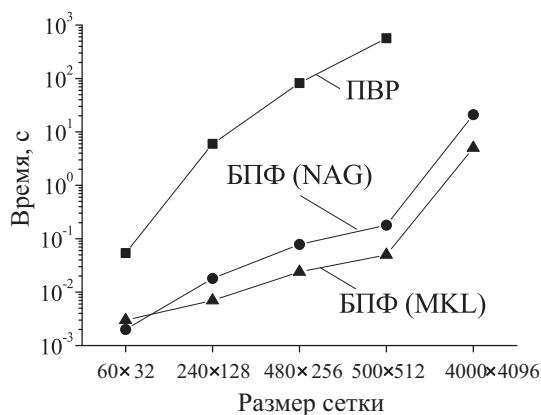


Рис. 3. Сравнение времени расчета 0-й гармоники потенциала с помощью метода ПВР и метода преобразования Фурье. Процедура, реализующая быстрое преобразование Фурье, была взята из библиотек NAG и MKL. Размер сетки для отдельной гармоники $N_R \times N_Z = 500 \times 512$, расчет проведен на процессоре Itanium2

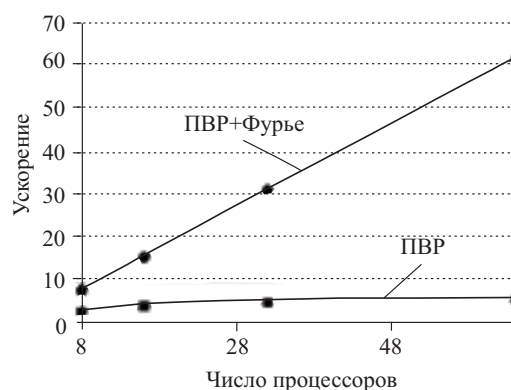


Рис. 4. Ускорение программы в целом с учетом решения уравнения Власова–Лиувилля методом частиц. Система линейных уравнений для первой гармоники потенциала решается с помощью преобразования Фурье, для всех остальных гармоник методом ПВР. В другом случае все гармоники вычисляются методом ПВР

перегруженности процессора, который содержит длинноволновую часть спектра.

Вычисления производились для сетки $500 \times 512 \times 512$ и 100 миллионов частиц (для решения уравнения Власова–Лиувилля). Реальное время вычисления на 8, 16, 32 и 64 процессорах сравнивается с виртуальной однопроцессорной машиной с соответствующим объемом памяти (8 Гб с учетом частиц). Расчеты проведены на кластере НКС-160 на основе процессора Itanium2, ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск.

Таким образом, решение наиболее трудоемких фурье-гармоник позволяет значительно улучшить ускорение параллельной программы, как показано на рис. 4. Возникает естественный вопрос: почему нельзя вычислять все гармоники с помощью преобразования Фурье, обеспечивая тем самым равномерную загрузку процессоров и линейное ускорение? В таком случае время расчета становится больше, чем при вычислении описанным комбинированным методом. Время счета по методу ПВР на 8 процессорах составляет 7 секунд для 512 гармоник, а по методу преобразования Фурье — 7.9 секунды. В реальных расчетах речь идет о десятках и сотнях тысяч временных шагов, поэтому преимущество комбинированного метода может измеряться сутками.

4. Заключение. В статье описан эффективный параллельный численный алгоритм, предназначенный для исследования нестационарных процессов в гравитирующих системах многих тел на многопроцессорных компьютерах МИМД-архитектуры. Для повышения эффективности вычислений и упрощения распараллеливания использованы итерационные алгоритмы с учетом особенностей рассматриваемых эволюционных процессов. Принципиальное отличие описанного подхода от прямых методов заключается в возможности обеспечить быструю сходимость при высокой точности, что необходимо для решения эволюционных задач в среде физической неустойчивости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Снытников В.Н., Вшивков В.А., Дудникова Г.И., Никитин С.А., Пармон В.Н., Снытников А.В. Численное моделирование гравитационных систем многих тел с газом // Вычислительные технологии. 2002. 7, № 3. 72–84.
2. Miller R.H. Validity of disk galaxy simulations // J. of Comp. Phys. 1976. 21, N 4. 400–437.
3. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. М.: Мир, 2001.
4. Ильин В.П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Наука, 1995.
5. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.
6. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
7. Numerical Algorithms Group. NAG Fortran Library (<http://www.nag.co.uk/numeric/FL/FLdocumentation.asp>).
8. Intel Math Kernel Library 10.0 (<http://www.intel.com/cd/software/products/asm0-na/eng/307757.htm>).

Поступила в редакцию
27.02.2009