

УДК 519.63

doi 10.26089/NumMet.v16r110

**ДЕКОМПОЗИЦИЯ ОБЛАСТИ НА ОСНОВЕ  
ПРЯМОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА  
В НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧАХ АСТРОФИЗИКИ**

**Н. В. Снытников<sup>1</sup>**

Предложен новый параллельный алгоритм для решения трехмерного уравнения Пуассона в контексте нестационарных задач астрофизики. Алгоритм основан на декомпозиции трехмерной области по двум направлениям, в применении прямого метода решения задачи Дирихле в каждой подобласти и в комбинации метода сопряжения подобластей для двумерного экранированного уравнения Пуассона с методом разделения переменных. Тестовые эксперименты проводились на суперкомпьютерах Межведомственного суперкомпьютерного центра (МСКЦ) и Сибирского суперкомпьютерного центра (ССКЦ).

**Ключевые слова:** уравнение Пуассона, задача Дирихле, декомпозиция области, гравитационный потенциал, звездная динамика, параллельное программирование, масштабируемость алгоритмов.

**1. Введение.** Компьютерное моделирование динамики звездного и газового компонентов в галактиках [1–3] или эволюции околозвездных дисков [4, 5] требует многократного решения трехмерного уравнения Пуассона для гравитационного потенциала совместно с решением уравнений для газовой динамики или динамики модельных частиц. Требования к пространственному разрешению при этом таковы, что сеточные функции не могут поместиться в оперативную память одного процессора даже в случае сеток среднего размера (порядка  $512^3$ ), не говоря уже об использовании миллиардов узлов (сетки  $1024^3$ ,  $2048^3$  и более).

В связи с этим необходимо выполнять пространственную декомпозицию области решения таким образом, чтобы каждая из подобластей (с соответствующими ей трехмерными сеточными функциями плотности и потенциала) могла быть обработана одним процессором и при этом пересылки трехмерных массивов данных между процессорами были бы минимальны.

Ранее, в статье [6], был предложен алгоритм для решения двумерного уравнения Пуассона, основанный на сопряжении смежных подобластей с помощью вычисления потенциала граничного слоя [7] и на использовании нестационарности исходной задачи для предвычисления вспомогательных величин в фурье-разложении потенциала граничного слоя (что идейно близко к подходу [8]). В настоящей статье этот метод адаптируется к применению в трехмерном случае: выполняется декомпозиция трехмерной области по двум направлениям, применяется метод разделения переменных (преобразование Фурье) по одному направлению и решается набор задач Дирихле для экранированного уравнения Пуассона.

Статья имеет следующую структуру. В разделе 2 представлено схематичное описание разработанного алгоритма для двумерного экранированного уравнения Пуассона (детальное описание может быть найдено в работе [6]). Раздел 3 посвящен описанию алгоритмов декомпозиции трехмерной области в одном и двух направлениях. В разделе 4 приведены результаты измерения производительности для программной реализации алгоритма.

**2. Параллельный метод решения двумерного экранированного уравнения Пуассона.** Пусть задана прямоугольная двумерная область  $\Omega$  с границей  $\Gamma$ . Требуется решить задачу Дирихле для следующего экранированного уравнения Пуассона в предположении, что эта задача должна решаться многократно для различных функций  $\rho$ :

$$\Delta\Phi(\mathbf{x}) - a^2\Phi(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}), \quad \Phi(\mathbf{x})|_{\Gamma} = 0. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{x} = (x, z)$  и  $a$  — некоторое произвольное вещественное число.

Введем равномерную сетку размером  $L_x \times L_z$  и с пространственными шагами  $h_x, h_z$ . Для индексации узлов сетки будем использовать индексы  $i = 0, \dots, L_x$  и  $k = 0, \dots, L_z$ . Запишем разностную задачу в виде

$$\frac{\Phi_{i+1,k} - 2\Phi_{i,k} + \Phi_{i-1,k}}{h_x^2} + \frac{\Phi_{i,k+1} - 2\Phi_{i,k} + \Phi_{i,k-1}}{h_z^2} - a^2\Phi_{i,k} = \rho_{ik}, \quad \Phi|_{\Gamma} = 0.$$

<sup>1</sup> Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, просп. Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск; науч. сотр., e-mail: nik@ssd.sccc.ru

Для решения этой разностной задачи можно воспользоваться методом, предложенным в [6]. Формулы вычисления потенциала  $\Phi$  при этом останутся прежними (см. формулы (3) и (4) из [6]); единственное различие состоит в том, что выражение  $S(m, n)$  содержит коэффициент  $a$ :

$$\Phi_{i_1 k} = \frac{1}{2L_x} \frac{1}{2L_y} \sum_{n=1}^{L_z-1} A_{i_0}(n) B_{i_1, i_0}(n) \sin \frac{\pi n k}{L_z}, \quad (2)$$

где:

$$A_{i_0}(n) = \sum_{k=1}^{L_z-1} \rho_{i_0 k} \sin \frac{\pi n k}{L_z}, \quad B_{i_1, i_0}(n) = \sum_{m=1}^{L_x-1} S(m, n) \sin \frac{\pi m i_0}{L_x} \sin \frac{\pi m i_1}{L_x}, \quad (3)$$

$$S(m, n) = \left[ -\frac{4 \sin^2 \frac{\pi m}{2L_x}}{h_x^2} - \frac{4 \sin^2 \frac{\pi n}{2L_z}}{h_z^2} - a^2 \right]^{-1}.$$

Все остальные алгоритмические построения из [6], включая древовидную структуру для вычисления потенциала для  $N$  подобластей и процессоров, останутся прежними. Таким образом, вычислительная трудоемкость решения экранированного двумерного уравнения Пуассона составит

$$T_{\text{calc}}(L_x, L_z, N) = O\left(\frac{L_x L_z (\log(L_x/N) + \log L_z)}{N}\right) + O(L_z \log L_z \log N).$$

**3. Параллельный метод решения трехмерного уравнения Пуассона.** Перейдем теперь к описанию метода декомпозиции для трехмерной прямоугольной области  $\Omega$  с границей  $\Gamma$ . Пусть требуется решить следующую задачу Дирихле для уравнения Пуассона в предположении, что эта задача должна решаться многократно для различных функций  $\rho$ :

$$\Delta \Phi(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}), \quad \Phi(\mathbf{x})|_{\Gamma} = 0. \quad (4)$$

Здесь  $\mathbf{x} = (x, y, z)$ .

Аналогично двумерному случаю введем равномерную сетку с количеством узлов  $L_x \times L_y \times L_z$  и пространственными шагами  $h_x, h_y, h_z$ . Для индексации узлов сетки будем использовать индексы  $i = 0, \dots, L_x, j = 0, \dots, L_y$  и  $k = 0, \dots, L_z$ . Аппроксимируя оператор Лапласа с помощью стандартного 7-точечного шаблона и применяя метод разделения переменных (разложение в ряд Фурье по синусам) в направлении  $y$ , получим следующую серию независимых систем уравнений:

$$\frac{\Phi_{i+1, k}(p) - 2\Phi_{i, k}(p) + \Phi_{i-1, k}(p)}{h_x^2} + \frac{\Phi_{i, k+1}(p) - 2\Phi_{i, k}(p) + \Phi_{i, k-1}(p)}{h_z^2} - a^2 \Phi_{i, k}(p) = \rho_{ik}(p). \quad (5)$$

Здесь  $a^2 = \frac{1}{h_y^2} 4 \sin^2 \frac{\pi l}{2L_y}$  и  $p = 1, \dots, L_y - 1$ . Каждое из этих уравнений является разностным аналогом двумерного экранированного уравнения Пуассона (1) и может быть решено с помощью метода, изложенного в [6]. Таким образом, сформулируем следующий алгоритм для декомпозиции трехмерной области по одному направлению.

**Алгоритм 1.** Декомпозиция трехмерной области по одному направлению.

1. Область решения подразделяется на  $N = N_x$  подобластей по одному направлению  $x$ . Каждой подобласти  $\Omega_n$  назначается свой процессор  $P_n$ .
2. В каждой подобласти  $\Omega_n$  выполняется преобразование Фурье (разложение в ряд по синусам) в направлении  $y$ .
3. Параллельно решаются задачи (5) методом декомпозиции для двумерного экранированного уравнения Пуассона.
4. В каждой подобласти  $\Omega_n$  выполняется обратное преобразование Фурье в направлении  $y$ .
5. В итоге на каждом процессоре будет получена соответствующая его подобласти  $\Omega_n$  сеточная функция потенциала.

Ясно, что такой алгоритм может быть применен только в том случае, когда  $N_x \ll L_x$  (например,  $N_x = 32$ ,  $L_x = 1024$ ). Однако для сеток порядка  $1024^3$  использование 32 процессоров будет недостаточно, поэтому необходима декомпозиция в двух направлениях. С одной стороны, вследствие независимости систем уравнений (5) можно применить метод декомпозиции на основе транспозиции [9–11] в направлении  $y$  и  $z$ . Вместе с тем, подобный метод будет наследовать часть проблем, присущих транспонированию данных, связанных с большим объемом межпроцессорных коммуникаций.

В этой связи более перспективной альтернативой является двукратное применение алгоритма 1. Это позволит сократить объем межпроцессорных коммуникаций.

**Алгоритм 2.** Декомпозиция трехмерной области по двум направлениям.

1. Область решения подразделяется на  $N = N_x \times N_y$  одинаковых подобластей по двум направлениям  $x$  и  $y$ . Каждой подобласти назначается свой процессор.
2. В каждой подобласти решаем однородную задачу Дирихле для уравнения Пуассона и применяем алгоритм 1 к объединению этих подобластей в направлении  $y$ .
3. Вычисляем величину экранирующих зарядов на границе подобластей в направлении  $x$ .
4. Применяем алгоритм 1 по направлению  $x$  для вычисления потенциала на границах подобластей.
5. В каждой подобласти решаем задачу Дирихле для уравнения Лапласа с краевыми условиями, полученными на предыдущем шаге.
6. Итоговое решение будет получено как сумма сеточного решения уравнения Лапласа и решения уравнения Пуассона.

**4. Тестовые эксперименты.** Тестовые эксперименты проводились на двух суперкомпьютерах: на МВС-100К в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН (четырёхъядерные процессоры Intel Xeon E5450 3 ГГц, с использованием MVARICH-1.2 и компиляторов Intel C++ 12) и на суперкомпьютере в Сибирском суперкомпьютерном центре (четырёхъядерные процессоры Intel Xeon E5540 2.53 ГГц, с использованием Intel MPI 4.1 и компиляторов Intel C++ 14). Для выполнения быстрого преобразования Фурье использовалась библиотека FFTW 3.1.4 [12]. Далее приведены только те результаты, которые получены в Межведомственном суперкомпьютерном центре.

При замерах производительности время решения алгоритма 2 разбивалось на три части: суммарное время решения уравнения Пуассона и Лапласа ( $T_{\text{calc}}$ ), коммуникационная часть: передача массивов данных между процессорами с помощью MPI-процедуры MPI\_SendRecv и транспозиции граничных значений между подобластями ( $T_{\text{comm}}$ ), вычисление потенциала выделенного слоя и граничных условий ( $T_{\text{prop}}$ ).

В таблице приведены результаты расчетов для сеток размера  $1024^3$  и  $2048^3$  с разным числом процессоров;  $T_{\text{all}}$  — общее время счета, равное сумме  $T_{\text{calc}}$ ,  $T_{\text{comm}}$  и  $T_{\text{prop}}$ . Из таблицы следует, что при увеличении количества процессоров от 64 до 1024 и сохранении размеров задачи (оценка так называемой сильной масштабируемости) коммуникационные расходы возрастают в процентном выражении с 7% до 25%. С другой стороны, сопоставив результаты запуска для 1024 процессоров на сетке  $1024^3$  и для 1024 процессоров на сетке  $2048^3$ , заключаем, что коммуникационные расходы для большей задачи уменьшаются до 15%.

**5. Заключение.** Разработан метод декомпозиции области на основе прямого метода решения трехмерного уравнения Пуассона для вычисления гравитационного потенциала в контексте нестационарных задач астрофизики. Его основным преимуществом является небольшой объем межпроцессорных коммуникаций. Тестовые эксперименты показали хорошую производительность алгоритма для расчетов по крайней мере до 1024 процессоров на сетках  $1024^3$  и  $2048^3$ .

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект 14-11-00485).

Оценка производительности алгоритма

Число процессоров и размеры сетки		Время решения (секунды)			
$N = N_x \times N_y$	$L_x \times L_y \times L_z$	$T_{\text{all}}$	$T_{\text{calc}}$	$T_{\text{comm}}$	$T_{\text{prop}}$
64 = 8 × 8	1024 × 1024 × 1024	8.33	7.34	0.48	0.50
256 = 16 × 16	1024 × 1024 × 1024	2.32	1.72	0.27	0.32
1024 = 32 × 32	1024 × 1024 × 1024	0.82	0.43	0.18	0.20
1024 = 32 × 32	2048 × 2048 × 2048	5.24	3.64	0.79	0.81

Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции “Параллельные вычислительные технологии” (ПаВТ-2015; <http://agora.guru.ru/pavt2015>).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Вшивков В.А., Снытников В.Н., Снытников Н.В.* Моделирование трехмерной динамики вещества в гравитационном поле на многопроцессорных ЭВМ // Вычислительные технологии. 2006. **11**, № 2. 15–27.
2. *Vshivkov V.A., Lazareva G.G., Snytnikov A.V., Kulikov I.M., Tutukov A.V.* Hydrodynamical code for numerical simulation of the gas components of colliding galaxies // The Astrophysical Journal Supplement Series. 2011. **194**, N 2. 1–12.
3. *Springel V., Yoshida N., White S.D.M.* GADGET: a code for collisionless and gasdynamical cosmological simulation // New Astronomy. 2001. **6**, N 2. 79–117.
4. *Снытников В.Н., Вшивков В.А., Кукшова Э.А., Неупокоев Е.В., Никитин С.А., Снытников А.В.* Трехмерное численное моделирование нестационарной гравитирующей системы многих тел с газом // Письма в астрономический журнал. 2004. **30**, № 2. 146–160.
5. *Вшивков В.А., Снытников А.В.* Построение эффективного параллельного метода решения уравнения Пуассона для моделирования эволюции протопланетного диска // Вычислительные методы и программирование. 2009. **10**. 116–122.
6. *Снытников Н.В.* Параллельный алгоритм для решения 2D-уравнения Пуассона в контексте нестационарных задач // Вычислительные методы и программирование. 2015. **16**. 39–51.
7. *Huang J., Greengard L.* A fast direct solver for elliptic partial differential equations on adaptively refined meshes // SIAM J. Sci. Comput. 1999. **21**, N 4. 1551–1566.
8. *Terekhov A.V.* Parallel dichotomy algorithm for solving tridiagonal system of linear equations with multiple right-hand sides // Parallel Computing. 2010. **36**, N 8. 423–438.
9. *Ayala O., Wang L.-P.* Parallel implementation and scalability analysis of 3D fast Fourier transform using 2D domain decomposition // Parallel Computing. 2013. **39**, N 1. 58–77.
10. *Duy T.V.T., Ozaki T.* A decomposition method with minimum communication amount for parallelization of multi-dimensional FFTs // Computer Physics Communications. 2014. **185**, N 1. 153–164.
11. Intel Math Kernel Library 10.0 — Overview (<http://www.intel.com/cd/software/products/asm-na/eng/307757.htm>).
12. *Frigo M., Johnson S.G.* FFTW software (<http://www.fftw.org>).

Поступила в редакцию  
02.02.2015

---

## Domain Decomposition Based on a Direct Method for Solving the Three-Dimensional Poisson’s Equation in Nonstationary Astrophysical Problems

N. V. Snytnikov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; prospekt Lavrentyeva 6, Novosibirsk, 630090, Russia; Ph.D., Scientist, e-mail: [nik@ssd.sccc.ru](mailto:nik@ssd.sccc.ru)*

Received February 2, 2015

**Abstract:** A new parallel algorithm for solving the three-dimensional Poisson’s equation in the context of nonstationary problems of astrophysics is proposed. This algorithm is based on a decomposition of the 3D domain in two directions, on the application of a direct method for solving the Dirichlet problem in each subdomain, and on a combination of subdomain coupling for the screened Poisson’s equation with the variable separation method. Test experiments were conducted on supercomputers installed at the Joint Supercomputing Center of Russian Academy of Sciences (Moscow) and at the Siberian Supercomputing Center (Novosibirsk).

**Keywords:** Poisson’s equation, Dirichlet problem, domain decomposition, gravitational potential, stellar dynamics, parallel programming, scalability of algorithms.

## References

1. V. A. Vshivkov, V. N. Snytnikov, and N. V. Snytnikov, "Simulation of the Three-Dimensional Dynamics of Matter in the Gravitational Field Using Multiprocessor Computers," *Vychisl. Tekhnol.* **11** (2), 15–27 (2006).
2. V. A. Vshivkov, G. G. Lazareva, A. V. Snytnikov, et al., "Hydrodynamical Code for Numerical Simulation of the Gas Components of Colliding Galaxies," *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **194** (2), 1–12 (2011).
3. V. Springel, N. Yoshida, and S. D. M. White, "GADGET: A Code for Collisionless and Gasdynamical Cosmological Simulation," *New Astr.* **6** (2), 79–117 (2001).
4. V. N. Snytnikov, V. A. Vshivkov, E. A. Kuksheva, et al., "Three-Dimensional Numerical Simulation of a Nonstationary Gravitating  $N$ -Body System with Gas," *Pis'ma v Astron. Zh.* **30** (2), 146–160 (2004) [*Astron. Lett.* **30** (2), 124–137 (2004)].
5. V. A. Vshivkov and A. V. Snytnikov, "Development of an Efficient Parallel Poisson Equation Solver for the Simulation of Protoplanetary Disk Evolution," *Vychisl. Metody Programm.* **10**, 116–122 (2009).
6. N. V. Snytnikov, "A Parallel Algorithm for Solving 2D Poisson's Equation in the Context of Nonstationary Problems," *Vychisl. Metody Programm.* **16**, 39–51 (2015).
7. J. Huang and L. Greengard, "A Fast Direct Solver for Elliptic Partial Differential Equations on Adaptively Refined Meshes," *SIAM J. Sci. Comput.* **21** (4), 1551–1566 (1999).
8. A. V. Terekhov, "Parallel Dichotomy Algorithm for Solving Tridiagonal System of Linear Equations with Multiple Right-Hand Sides," *Parallel Comput.* **36** (8), 423–438 (2010).
9. O. Ayala and L.-P. Wang, "Parallel Implementation and Scalability Analysis of 3D Fast Fourier Transform Using 2D Domain Decomposition," *Parallel Comput.* **39** (1), 58–77 (2013).
10. T. V. T. Duy and T. Ozaki, "A Decomposition Method with Minimum Communication Amount for Parallelization of Multi-Dimensional FFTs," *Comput. Phys. Commun.* **185** (1), 153–164 (2014).
11. Intel Math Kernel Library 10.0: Overview. <https://software.intel.com/en-us/intel-mkl>. Cited January 28, 2015.
12. M. Frigo and S. G. Johnson, "FFTW software," <http://www.fftw.org>. Cited January 28, 2015.