

**В. А. Вшивков, Э. А. Кукшева, С. А. Никитин,
А. В. Снытников, В. Н. Снытников**

(Новосибирск)

О ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ ЧИСЛЕННОЙ МОДЕЛИ ФИЗИКИ ГРАВИТИРУЮЩИХ СИСТЕМ*

Рассмотрена параллельная реализация и вычислительные аспекты задачи моделирования динамики гравитирующих систем, в частности протопланетного диска. Математическая модель диска включает в себя многомерное кинетическое уравнение Власова – Лиувилля, уравнение Пуассона и газодинамические уравнения. Одной из основных проблем численного моделирования гравитационной динамики является необходимость многократного решения уравнения Пуассона. Представлен быстрый параллельный алгоритм решения этого уравнения и алгоритм динамической балансировки загрузки процессорных элементов, учитывающие физические особенности задачи.

Введение. В исследованиях нестационарных процессов в гравитационной физике существуют две связанные между собой проблемы [1, 2]:

1. Найти механизм самоорганизации околос звездного диска, который сгущает вещество, разрушает диск и создает планеты.

2. Определить физические условия: давление, температуру и другие параметры среды, которые могут иметь место в околос звездном диске при его самоорганизации.

Решение этих проблем может быть найдено при разработке численной модели динамики вещества в условиях развития гравитационной неустойчивости и проведении крупномасштабных вычислительных экспериментов с использованием современных суперЭВМ.

Методы решения задач гравитационной динамики. Существует несколько методов численного решения уравнений гравитационной физики. Первый из них – непосредственное вычисление взаимодействия частиц, так называемый метод «частица–частица», или P^2 [3]. Этот метод является наиболее трудоемким, его сложность – $O(N^2)$, где N – число частиц. Для расчета движения частицы в этом методе необходимо знание координат всех осталь-

* Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 02-01-00864), Интеграционных проектов СО РАН (гранты № 43, № 148), федеральной программы «Интеграция» (контракт № Б-0072/836), программ Президиума РАН (№ 4, № 6.6 2003 г.).

ных частиц. Таким образом, моделирование с использованием более чем 10^5 частиц невозможно даже на суперкомпьютерах [4].

Модификацией P^2 -метода является так называемый древесный алгоритм (treecode) [5], в котором близко расположенные частицы объединяются в группы так, чтобы можно было вычислить силу притяжения группы частиц как одной частицы той же массы. Если такая аппроксимация силы оказывается неточной, то группа разбивается на более мелкие подгруппы. Разбиение частиц на группы имеет вид восьмеричного дерева, отсюда название метода. Этот метод работает существенно быстрее, нежели P^2 , его сложность – $O(N \log N)$. Распределение загрузки процессоров выполняется во время построения дерева. Основной недостаток метода – изменение силы межчастичного взаимодействия.

В методе «частица–сетка», или PM, в пространстве вводится сетка, на которой по координатам частиц вычисляется плотность вещества. Далее, путем решения уравнения Пуассона по плотности вычисляется потенциал. Для каждой из частиц сила вычисляется интерполяцией значений, вычисленных на сетке, в местоположение данной частицы. Точность определения потенциала повышается с увеличением числа частиц.

PM-метод – наиболее быстрый из существующих, его сложность – $O(N \log M)$, где M – число узлов сетки. При неравномерном распределении объема вычислений по процессорным элементам мультимпьютера используется динамическая балансировка загрузки [6]. В работе [7] предложен алгоритм динамической балансировки загрузки для PM-метода, основанный на разделении задачи на множество небольших подзадач, которые назначаются на процессоры по мере освобождения последних.

Если для задач гравитационной динамики основная часть времени тратится на решение уравнения Пуассона, то исключительно важно построить быстрый алгоритм решения этого уравнения, что и является целью данной работы.

Исходные уравнения. Поведение гравитирующей системы описывается системой уравнений звездной динамики, состоящей из кинетического уравнения Власова – Лиувилля и уравнения Пуассона для потенциала самосогласованного гравитационного поля. Эта система дополняется газодинамическими уравнениями. Уравнение Власова – Лиувилля в бесстолкновительном приближении усредненного самосогласованного поля записывается в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f + \mathbf{a} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0,$$

где f – зависящая от времени t одночастичная функция распределения по координате \mathbf{r} и скорости \mathbf{v} ; \mathbf{a} – ускорение частиц единичной массы. Гравитационный потенциал Φ , в котором происходит движение, можно разделить на две части:

$$\Phi = \Phi_1 + \Phi_2,$$

где Φ_1 в зависимости от моделируемых условий представляет собой фиксированный или медленно меняющийся потенциал. Вторая часть потенциала Φ_2 определяется совокупным распределением движущихся частиц и удов-

летворяет уравнению Пуассона $\Delta\Phi_2 = 4\pi G\rho$ (где G – гравитационная постоянная), которое в выбранных для решения цилиндрических координатах запишется как

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Phi_2}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial z^2} = 4\pi G\rho.$$

Часть модели, относящаяся к газовой динамике, описывает поведение газовой компоненты гравитирующей системы. Она состоит из следующих уравнений:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0,$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p - \rho \nabla \Phi + \mathbf{F}_{fr},$$

$$\rho \frac{dh}{dt} = -\rho \nabla \Phi \mathbf{v} + \frac{\partial p}{\partial t} + Q_r - \nabla \mathbf{q}.$$

Эти уравнения описывают изменения массы, импульса и энергии в некоторой точке пространства. Здесь \mathbf{F}_{fr} – объемная сила трения, возникающая при наличии твердой фазы; h – энтальпия единицы объема; Q_r – радиационное поглощение; \mathbf{q} – тепловой поток.

Модель бесконечно тонкого изотермического диска. В этой модели исключается из рассмотрения движение вдоль оси вращения [2]. При этом упрощении физической модели можно ожидать понижения затрат по памяти, времени вычислений и времени межпроцессорных коммуникаций.

В случае бесконечно тонкого изотермического диска объемная плотность подвижной среды ρ во всем объеме равна 0. На самом диске возникает разрыв нормальной производной потенциала, что дает граничное условие для определения потенциала Φ_2 :

$$\frac{\partial \Phi_2}{\partial z} = 2\pi G\sigma,$$

где σ – поверхностная плотность.

Численные методы. Решение уравнения Власова. Для решения кинетического уравнения Власова используется метод частиц в ячейках [2]. В начальный момент времени модельные частицы одинаковой массы размещаются в области решения так, чтобы их количество было пропорционально плотности и размеру ячейки. Частицы имеют скорость, равную скорости вещества в соответствующей точке. Решение уравнений движения частиц осуществляется по модификации известной схемы Бориса [8].

Решение газодинамических уравнений. Для решения системы газодинамических уравнений использован метод «крупных частиц» [9]. Этот метод наиболее хорошо согласуется с методом частиц решения кинетического уравнения Власова – Лиувилля. Метод позволяет отслеживать границы газ-вакуум, автоматически выполняет законы сохранения массы и момента импульса. Реализованный вариант схемы имеет первый порядок точности по

пространственным переменным и времени. При выборе схемы в целях моделирования принято во внимание, что схема первого порядка точности из данного класса обладает схемной вязкостью, которая подавляет счетную дисперсию. Отсутствие счетных флуктуаций плотности необходимо для расчета физических неустойчивостей гравитационного типа. Кроме того, в схемах более высокого порядка точности возникают с точки зрения реализации сложные проблемы на границах с вакуумом.

Решение уравнения Пуассона. Уравнение Пуассона решается на сетке в цилиндрической системе координат для того, чтобы учесть симметрию диска и исключить нефизические структуры, возникающие при моделировании в декартовых координатах [10]. Это уравнение имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_r^2 r_{i-1/2}} [r_i (\Phi_{i+1/2, k-1/2, l} - \Phi_{i-1/2, k-1/2, l}) - \\ & - r_{i-1} (\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} - \Phi_{i-3/2, k-1/2, l})] + \\ & + \frac{1}{h_\phi^2 r_{i-1/2}^2} [\Phi_{i-1/2, k+1/2, l} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \Phi_{i-1/2, k-3/2, l}] + \\ & + \frac{1}{h_z^2} [\Phi_{i-1/2, k-1/2, l-1} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \Phi_{i-1/2, k-1/2, l+1}] = 0, \\ & i=1, \dots, I_{\max}; \quad k=1, \dots, K_{\max}; \quad l=1, \dots, L_{\max} - 1, \end{aligned}$$

где I_{\max} , K_{\max} , L_{\max} – число узлов по радиальной, угловой и вертикальной координатам соответственно; i, k, l – номера рассматриваемых узлов сетки в этих координатах; $r_{i-1/2}$ – радиальная координата i -го узла; h_r , h_ϕ и h_z – размеры сетки. Периодические граничные условия по углу дают

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2, -1/2, l} &= \Phi_{i+1/2, K_{\max} - 1/2, l}, \\ \Phi_{i+1/2, K_{\max} + 1/2, l} &= \Phi_{i+1/2, 1/2, l}. \end{aligned}$$

При $i=0$

$$\Phi_{-1/2, k-1/2, l} = \Phi_{1/2, k-1/2, l}.$$

Остальные граничные условия задаются по формуле

$$\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} = -\frac{M}{R},$$

где M – полная масса диска, а R – расстояние от центра до соответствующей точки границы.

Полученная при аппроксимации уравнения Пуассона система линейных алгебраических уравнений плохо обусловлена, причем с уменьшением шага h обусловленность ухудшается, как отмечено в [2]. Это приводит к тому, что прямые методы решения (метод исключения Гаусса, метод преобразования Фурье) могут накапливать при решении нестационарных задач большую не-

контролируемую ошибку, критическую для изучения физической неустойчивости. С другой стороны, итерационные методы требуют огромного количества итераций. Поэтому предлагается метод решения уравнений, представляющий собой комбинацию прямых и итерационных методов.

Общая структура метода решения показана на рис. 1. Первый шаг – быстрое преобразование Фурье (БПФ) по угловой координате, в результате чего получается K_{\max} систем линейных алгебраических уравнений для амплитуд гармоник потенциала:

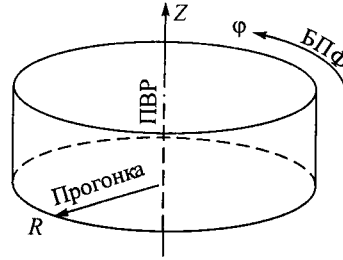


Рис. 1

$$\frac{1}{h_r^2 r_{i-1/2}} [r_i H_{i+1/2, l}(m) + r_{i-1} H_{i-3/2, l}(m)] +$$

$$+ \frac{1}{h_z^2} [H_{i-1/2, l-1}(m) + H_{i-1/2, l+1}(m)] +$$

$$+ \left[\frac{1}{h_r^2} + \frac{1}{h_z^2} + \frac{2}{h_\phi^2 r_{i-1/2}^2} \sin^2 \frac{\pi m}{K_{\max}} \right] H_{i-1/2, k-1/2, l} = 0,$$

$$i = 1, \dots, I_{\max}; \quad l = 1, \dots, L_{\max} - 1,$$

где m – номер гармоники, или угловое волновое число. Каждая из этих систем уравнений полностью независима друг от друга.

Далее двумерное уравнение для каждой гармоники решается методом верхней релаксации с прогонкой (ПВР) по радиальной координате. После окончания итерационного процесса выполняется обратное преобразование Фурье для значений потенциала в плоскости диска.

Распараллеливание алгоритмов. Сборочная технология использована для распараллеливания задачи и параллельной реализации программы. Она базируется на двух основных положениях. Во-первых, целая программа собирается из готовых фрагментов вычислительного алгоритма (например, процедур). Эти фрагменты должны быть достаточно малы (т. е. потреблять мало ресурсов). Во-вторых, фрагментированность программы сохраняется в ходе вычисления. В любой момент времени любой фрагмент может быть извлечен из исполняющейся программы и передан для исполнения на другой процессорный элемент (ПЭ) мультимпьютера. Это приводит к тому, что исполняемая программа представляется множеством асинхронно взаимодействующих процессов. Коммуникации определяют отношение частичного порядка на множестве процессов. Процессы назначаются для исполнения на ПЭ мультимпьютера с сохранением отношения частичного порядка. Это означает, что взаимодействующие процессы назначаются на один и тот же ПЭ или на различные ПЭ, соединенные каналами связи, обеспечивая реализацию межпроцессных коммуникаций с хорошей производительностью. Кроме того, должна быть обеспечена одинаковая загрузка всех ПЭ. Если один из ПЭ перегружен, тогда некоторые из процессов должны покинуть его

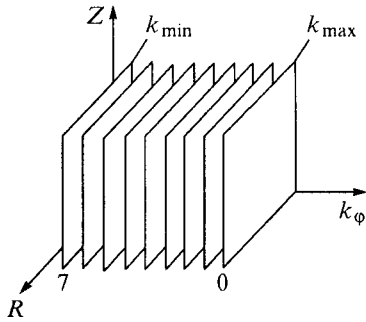


Рис. 2

и переместиться на соседние недогруженные процессоры (диффузионная динамическая балансировка загрузки). Известно большое количество алгоритмов динамической балансировки загрузки [6].

Так как уравнение Пуассона, уравнение Власова – Лиувилля и газодинамические уравнения решаются отдельно друг от друга, то программа моделирования также разделена на три части, соответствующие этим уравнениям. Решение уравнений газовой динамики происходит очень быстро по сравнению с решением уравнений Пуассона и Власова – Лиувилля, поэтому эта процедура не распараллеливается.

Газодинамические уравнения решаются на каждом процессоре, что помогает сократить объем межпроцессорных коммуникаций. Для решения уравнения Власова – Лиувилля частицы разделяются между процессорами равномерно без учета их расположения в пространстве. Это означает, что для расчета движения частиц каждый процессор должен знать распределение потенциала во всей плоскости диска. Распараллеливание решения уравнения Власова – Лиувилля не рассматривается подробно, так как в случае плоского протопланетного диска на решение этого уравнения тратится менее 10 % времени. Более детальный анализ распараллеливания метода частиц можно найти в [6].

Опишем подробно решение уравнения Пуассона, так как именно эта часть программы представляет наибольшую сложность. Одной из основных задач распараллеливания является минимизация обмена данными между процессорами. В предлагаемом методе решения уравнения Пуассона обмен данными удастся полностью исключить на этапе проведения итераций. Это возможно, так как уравнения для фурье-гармоник потенциала не зависят друг от друга. При этом удастся использовать дешевые мультимедийные компьютеры с низкой скоростью коммуникаций. После окончания этапа итераций значения фурье-гармоник в плоскости диска собираются со всех процессоров для дальнейших вычислений. Таким образом, появляется возможность разделить область решения на полностью независимые подобласти по угловым волновым числам, как показано на рис. 2. Первоначально деление области равномерное, каждый процессор получает одинаковое количество гармоник.

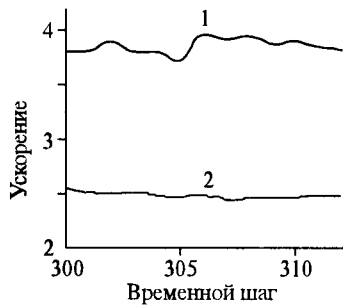


Рис. 3

Межпроцессные коммуникации в программе реализованы с помощью коллективных операций библиотеки MPI. На каждом временном шаге процесса моделирования обмен данными между процессорами выполняется дважды. Во-первых, после завершения итераций выполняется сборка гармоник потенциала в плоскости диска для обратного преобразования Фурье. Затем после вычисления плотности в каждом процессоре их вклады суммируются.

Число процессоров	Размер сетки	Число частиц	Время расчета одного временного шага, с
8	80 млн.	20 млн.	7,2
64	2 млрд.	1 млрд.	141
64	3,2 млрд.	400 млн.	229,8
128	3,2 млрд.	400 млн.	180

Двумерные системы уравнений гармоник потенциала требуют различное количество итераций для достижения сходимости. Число итераций определяется обусловленностью матрицы системы двумерных уравнений. Это означает, что при равномерном распределении гармоник по процессорным элементам их загрузка будет различной. Более того, невозможно изначально задать равную загрузку для всех ПЭ.

При запуске программы на каждый ПЭ назначается одинаковое количество гармоник. Однако из различных условий сходимости для длинноволновых и коротковолновых гармоник следует, что может быть один ПЭ, загрузка которого заметно превышает загрузку всех остальных. Реальная загрузка ПЭ вычисляется после завершения итераций во всех процессорах.

ПЭ считается перегруженным, если его загрузка превышает некоторый порог, тогда часть гармоник должна покинуть перегруженный процессор. В отличие от чистых диффузионных алгоритмов гармоника, требующая наименьшего количества итераций, перемещается на ПЭ с самой малой загрузкой. Процесс передачи гармоник продолжается до тех пор, пока этот ПЭ остается перегруженным или пока на нем остается только одна гармоника. Тем самым оптимальное распределение загрузки в данном алгоритме динамической балансировки достигается за счет использования физических особенностей задачи.

На рис. 3 показано ускорение расчета на четырех процессорах в течение нескольких следующих друг за другом временных шагов (с 300-го по 312-й) с динамической балансировкой загрузки (кривая 1) и без нее (кривая 2).

Численные эксперименты. Все численные эксперименты проводились на мультимониторном МВС-1000М в Сибирском суперкомпьютерном центре (г. Новосибирск) и в Межведомственном суперкомпьютерном центре (Москва). Отладка программы проводилась на рабочей станции с двумя про-



Рис. 4

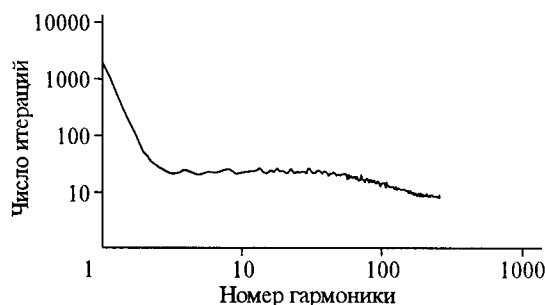


Рис. 5

цессорами Pentium III под управлением операционной системы Linux. Параметры некоторых расчетов приведены в таблице.

На рис. 4 приведено ускорение расчета на отладочной сетке 40,9 млн. узлов с 20 млн. частиц. Из графика следует, что эффективность распараллеливания достаточно высока – 85 %, если число процессоров меньше 16. При увеличении числа процессоров ускорение ухудшается и при числе процессоров более 128 практически отсутствует. Это связано с тем, что итерационный процесс для некоторых длинноволновых гармоник сходится очень медленно. Если такая гармоника выделяется на отдельный процессор, время счета не может быть уменьшено. Дальнейшее увеличение числа процессоров не дает никакого ускорения. Рис. 5 показывает зависимость числа итераций от номера гармоники, требуемых для достижения сходимости по каждой гармонике потенциала на 10-м временном шаге процесса моделирования.

Так как распределение плотности изначально симметрично по угловой координате, то после преобразования Фурье только нулевая гармоника не равна 0. Поэтому сходимость для всех остальных гармоник достигается за одну итерацию. Очевидно, на первом шаге работает только один процессор, содержащий эту гармонику. В дальнейшем распределение плотности теряет симметрию по угловой координате (рис. 6). Тем не менее расчет длинноволновых гармоник занимает основное время. Следовательно, процессоры во время решения уравнения Пуассона оказываются неравномерно загруженными, причем неравномерность усиливается с увеличением числа процессоров.

Важно отметить, что для различных сеток значения ускорения отличаются. При переходе с 64 процессоров на 128 на графике время расчета уменьшилось только на 2 %. При увеличении сетки время расчета растет быстрее, чем время на коммуникации. Так, для сетки размером 3,2 млрд. узлов (см. таблицу) при переходе с 64 процессоров на 128 расчетное время уменьшилось на 20 %.



Рис. 6

Таким образом, для достижения оптимальной загрузки ПЭ необходимо уменьшение размера минимального фрагмента задачи, т. е. распараллеливание решения двумерного уравнения для гармоники потенциала. При этом появится возможность использовать все ПЭ мультимпьютера для расчета реальной физической задачи.

Заключение. В работе показано, что для существующих суперЭВМ может быть создана параллельная программа, которая позволит за приемлемое время расчета провести вычислительные эксперименты по изучению процессов самоорганизации в системе большого числа тел. Достигнутое значение такого параметра задачи, как число используемых частиц, по своей величине либо соответствует в гравитационной физике реальному числу объектов порядка 10^9 , либо приближается к нему (число звезд в галактиках $10^{10} - 10^{12}$). Возможность проведения вычислительных экспериментов реализована в первую очередь за счет построенного параллельного метода расчета самосогласованного гравитационного поля. Предложена и опробована в реальных расчетах схема динамической балансировки загрузки, основанная на использовании особенностей задачи.

Авторы выражают благодарность академику В. Н. Пармону, академику А. С. Алексееву и профессору В. Э. Малышкину за поддержку и интерес к работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Snytnikov V. N., Dudnikova G. I., Gleaves J. T. et al. Space chemical reactor of protoplanetary disk // Adv. Space Res. 2002. 30, N 6. P. 1461.
2. Снытников В. Н., Вшивков В. А., Дудникова Г. И. и др. Численное моделирование гравитационных систем многих тел с газом // Вычислительные технологии. 2002. 7, № 3. С. 72.
3. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987.
4. Griv E., Gedalin M., Liverts E. et al. Particle modeling of disk-shaped galaxies of stars on nowadays concurrent supercomputers // <http://xxx.lanl.gov/astro-ph/0011445>
5. Miocchi P., Capuzzo-Dolcetta R. An efficient parallel tree-code for the simulation of self-gravitating systems // <http://xxx.lanl.gov/astro-ph/0104152>
6. Краева М. А., Малышкин В. Э. Динамическая балансировка загрузки в реализации PIC-метода на MIMD мультимикомпьютерах // Программирование. 1999. № 1.
7. Caretti E., Messina A. Dynamic Work Distribution for PM Algorithm // <http://xxx.lanl.gov/astro-ph/0005512>
8. Boris J. P. Relativistic plasma simulation – optimization of a hybrid code // Proc. of the Fourth Conf. Num. Sim. Plasmas. Washington, 1970. P. 3.
9. Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М. Метод крупных частиц в газовой динамике. М: Наука, 1982.
10. Вшивков В. А., Малышкин В. Э., Снытников А. В., Снытников В. Н. Численное моделирование гравитационной динамики многих тел методом частиц в ячейках: параллельная реализация // СибЖВМ. 2003. 6, № 1. С. 25.

*Институт вычислительных технологий СО РАН,
Институт ядерной физики СО РАН,
Институт катализа СО РАН,
Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
E-mail: snytav@ssd.sccc.ru*

*Поступила в редакцию
9 апреля 2003 г.*