

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

А В Т О М Е Т Р И Я

---

---

2006, том 42, № 3

УДК 518.12

**ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ  
ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ  
ГРАВИТАЦИОННОЙ КОСМОДИНАМИКИ\***

**С. Е. Киреев**

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,  
Новосибирск  
E-mail: kireev@ssd.ssc.ru*

Рассмотрен алгоритм трехмерного моделирования динамики вращения пылевого облака методом частиц в ячейках. Приведены подходы к распараллеливанию методов частиц в ячейках. Выполнено сравнение трех вариантов параллельных реализаций. Наилучший вариант параллельной программы дал ускорение в 7 раз на 32 процессорах.

**Введение.** При изучении астрофизических процессов, в частности динамики галактик и протопланетных дисков, все большую роль приобретает численное моделирование вращения газопылевого облака. Общепринятая модель описания газопылевого диска включает в себя уравнения для двух компонент: пылевой и газовой. Для описания газовой компоненты используются уравнения газовой динамики. Поведение пылевой компоненты можно описать бесстолкновительным уравнением Власова.

Предлагаемая работа посвящена моделированию вращения пылевой компоненты в самосогласованном гравитационном поле при наличии центрального тела. Целью численного моделирования таких систем является изучение процессов образования и развития различных физических конфигураций (спирали, кольца), поэтому крайне важно обеспечить отсутствие численных неустойчивостей, которые могут существенно влиять на результат. Возможность численно решать подобные задачи появилась сравнительно недавно благодаря бурному развитию вычислительных технологий, и сейчас необходимо отработать методы их эффективного решения.

Численная модель пылевого облака в упрощенном виде сводится к задаче взаимодействия  $N$ -тел, движущихся под действием гравитационных сил [1–4]. Эта модель позволяет изучать процессы структуризации протопланетного диска или звездных скоплений под действием самогравитации. В насто-

---

\* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-01-00665), российско-голландского проекта NWO-GRID (контракт NWO-RFBS 047.016.007), российско-голландского проекта NWO-Plasma (контракт NWO-RFBS 047.016.018), программы Рособразования «Развитие научного потенциала ВШ» (проект РНП.2.2.1.1.3653).

ящее время известно множество методов, позволяющих решать задачи такого типа [1]. Так, при космологическом моделировании обычно применяются методы частица-сетка (particle-mesh (PM)) и древовидный алгоритм (Treecode), которые позволяют использовать в расчете большое число частиц. Также широко применяются различные гибридные методы, отдельно вычисляющие близкодействующие и далекодействующие силы. Как правило, используются равномерные сетки в декартовых координатах, что позволяет эффективно решать уравнение Пуассона с помощью метода быстрого преобразования Фурье (БПФ).

В данной работе рассматривается использование метода частица-сетка в задаче моделирования вращения самогравитирующего вещества. Значительное внимание уделено его параллельной реализации.

**Постановка задачи.** Модель движения самогравитирующего вещества описывается системой, состоящей из бесстолкновительного кинетического уравнения Власова – Лиувилля и уравнения Пуассона [5, 6]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial f}{\partial \bar{r}} + \frac{\bar{F}}{m} \frac{\partial f}{\partial \bar{u}} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial z^2} = 4\pi G \rho. \quad (2)$$

Здесь  $f(t, \bar{r}, \bar{u})$  – зависящая от времени  $t$  одночастичная функция распределения по координатам и скоростям;  $\bar{r} = \{x, y, z\}$  – координаты частиц;  $\bar{u} = \{u_x, u_y, u_z\}$  – скорости частиц;  $\bar{F} = -m \nabla \Phi$  – гравитационная сила, действующая на частицы;  $\rho(t, \bar{r}) = \int f(t, \bar{r}, \bar{u}) d\bar{u}$  – распределение плотности частиц в пространстве и времени;  $\Phi = \Phi_1 + \Phi_2$  – гравитационный потенциал, в котором происходит движение, состоящий из двух частей: первая часть  $\Phi_1$  представляет собой потенциал неподвижной центральной массы (галактической черной дыры, протозвезды), а вторая часть  $\Phi_2$  зависит от совокупного распределения движущихся частиц и удовлетворяет уравнению Пуассона (2).

При моделировании астрофизических систем, состоящих из большого числа объектов, эффекты столкновений оказываются пренебрежительно малыми. Частицы, используемые в моделировании, представляют собой, скорее, перенос средней массовой плотности, чем орбиты отдельных объектов. Движение каждой модельной частицы в значительной степени управляется локальным средним гравитационным полем и мало подвергается влиянию частного распределения других частиц в ее окрестности. Поэтому при моделировании таких систем модельные частицы берутся с равными массами, а при решении уравнения поля близкодействующие силы не учитываются [5, 7].

В данной работе решается трехмерная задача в декартовых координатах. Правильность результатов численного моделирования обеспечивается правильностью реализации численных методов и выполнением механических законов сохранения.

**Решение уравнения Власова.** Кинетическое уравнение Власова решается методом частиц в ячейках [5, 6]. В пространстве моделирования распределены модельные частицы, которые движутся под воздействием сил грави-

тации. Для каждой модельной частицы заданы пространственные координаты и скорость. Массы всех частиц одинаковы. Процесс решения состоит из двух чередующихся этапов: лагранжева и эйлера.

На лагранжевом этапе происходит вычисление новых скоростей и координат частиц под воздействием гравитационных сил. Используется схема с перешагиванием, имеющая второй порядок аппроксимации по времени:

$$m \frac{\mathbf{r}^{n+1/2} - \mathbf{r}^{n-1/2}}{\tau} = F(\mathbf{r}^n), \quad \frac{\mathbf{r}^{n+1} - \mathbf{r}^n}{\tau} = \mathbf{u}^{n+1/2}.$$

На эйлеровом этапе из распределения плотности находятся значения потенциала. Здесь на неподвижной декартовой сетке с постоянным шагом  $h$ , одинаковым по всем трем направлениям, решается уравнение Пуассона.

Способ вычисления плотности при переходе от лагранжевой сетки, связанной с частицами, к фиксированной эйлеровой определяется ядром метода. В данном случае использовалось ядро, называемое PIC-ядром (particle-in-cell (PIC)). Функция  $\tilde{R}(x, y, z)$  показывает для этого ядра вклад частицы в близлежащие узлы пространственной сетки в зависимости от их удаленности:

$$\tilde{R}(x, y, z) = \tilde{R}_1(x) \tilde{R}_1(y) \tilde{R}_1(z),$$

$$\tilde{R}_1(x) = \begin{cases} \frac{1}{h} \left(1 - \frac{x}{h}\right), & |x| < h; \\ 0, & |x| > h. \end{cases}$$

Значение плотности в ячейке с координатами  $i, k, l$  в некоторый фиксированный момент времени имеет вид

$$\rho_{i,k,l} = \sum_j m_j \tilde{R}(x_j - x_i, y_j - y_k, z_j - z_l),$$

где  $m_j, x_j, y_j, z_j$  – масса и координаты  $j$ -й частицы соответственно;  $x_i, y_k, z_l$  – координаты  $\{i, k, l\}$ -го узла сетки.

Порядок аппроксимации по пространству для данного ядра равен двум. Величина погрешности восстановления плотности по частицам обратно пропорциональна квадрату среднего числа частиц в ячейке.

Гравитационные силы на сетке вычисляются с использованием центральной разности, что также дает второй порядок аппроксимации по пространству:

$$F_{x_{i+\psi/2,k,l}}^n = -\frac{\Phi_{i,k,l}^n - \Phi_{i+1,k,l}^n}{h}, \quad F_{y_{i,k+\psi/2,j}}^n = -\frac{\Phi_{i,k,l}^n - \Phi_{i,k+1,l}^n}{h},$$

$$F_{z_{i,k,l+\psi/2}}^n = -\frac{\Phi_{i,k,l}^n - \Phi_{i,k,l+1}^n}{h}.$$

Силы, действующие на частицы, вычисляются с помощью линейной интерполяции из узлов сетки. В результате метод имеет второй порядок аппрок-

симации по пространству и первый по времени. Первый порядок получается в результате несогласованности этапов вычисления.

**Решение уравнения Пуассона.** Для получения распределения гравитационного потенциала в области моделирования на каждом временном шаге необходимо решать уравнение Пуассона. Решение выполняется методом БПФ по трем направлениям [5]. Этот метод является достаточно быстрым, но в то же время обеспечивает необходимую точность. Дискретизация вторых производных в трехмерном уравнении Пуассона производится по 27-точечной схеме, имеющей второй порядок аппроксимации:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h^2} \left( -\frac{38}{9} \Phi_{i,k,l} + \right. \\ & + \frac{4}{9} (\Phi_{i-1,k,l} + \Phi_{i+1,k,l} + \Phi_{i,k-1,l} + \Phi_{i,k+1,l} + \Phi_{i,k,l-1} + \Phi_{i,k,l+1}) + \\ & + \frac{1}{9} (\Phi_{i-1,k-1,l} + \Phi_{i-1,k+1,l} + \Phi_{i+1,k-1,l} + \Phi_{i+1,k+1,l} + \\ & + \Phi_{i-1,k,l-1} + \Phi_{i-1,k,l+1} + \Phi_{i+1,k,l-1} + \Phi_{i+1,k,l+1} + \\ & + \Phi_{i,k-1,l-1} + \Phi_{i,k-1,l+1} + \Phi_{i,k+1,l-1} + \Phi_{i,k+1,l+1}) + \\ & + \frac{1}{36} (\Phi_{i-1,k-1,l-1} + \Phi_{i-1,k-1,l+1} + \Phi_{i-1,k+1,l-1} + \Phi_{i-1,k+1,l+1} + \\ & \left. + \Phi_{i+1,k-1,l-1} + \Phi_{i+1,k-1,l+1} + \Phi_{i+1,k+1,l-1} + \Phi_{i+1,k+1,l+1}) \right) = \rho_{i,k,l}. \end{aligned}$$

Область моделирования (рис. 1), в которой решается уравнение Пуассона (ограничена пунктирной линией), превосходит по размерам область, в которой движутся частицы (ограничена сплошной линией). Это связано с тем, что значения потенциала на границах задаются как на бесконечности, поэтому границы сетки необходимо разместить достаточно далеко от центра масс. Получить значение потенциала на границе путем суммирования вкладов всех частиц или ячеек не представляется возможным ввиду больших временных затрат. Для нахождения значения потенциала на границе области при задании граничных условий используется мультипольное разложение:

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, z) &= \frac{M}{r} + \frac{M}{r^3} (I_x + I_y + I_z - 3I_0); \\ I_0 &= \frac{(I_x x^2 + I_y y^2 + I_z z^2) - 2(xyI_{xy} + yzI_{yz} + xzI_{xz})}{r^2}; \end{aligned} \quad (3)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

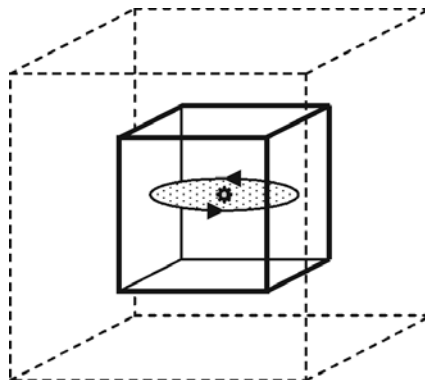


Рис. 1. Область моделирования

Здесь  $x, y, z$  – координаты точки пространства относительно центра масс. Полученная в результате формула вычисления потенциала (3) использует моменты инерции всей системы. По сравнению с простейшим представлением потенциала в бесконечно удаленной точке ( $M/r$ ) она позволила уменьшить расстояние от центра масс до границы для обеспечения требуемой точности и, следовательно, использовать меньшие сетки при незначительном увеличении времени счета.

**Контроль правильности расчета.** Для проверки правильности расчета контролируется выполнение следующих законов:

- сохранение массы системы (выполняется естественным образом: частицы никуда не вылетают из области);
- сохранение суммарного импульса системы;
- сохранение момента импульса;
- сохранение полной энергии системы.

**Параллельная реализация.** Рассматриваемая задача требует большого объема памяти и вычислительных ресурсов. Для типичной трехмерной задачи размер расчетной сетки составляет  $400 \times 400 \times 400$  ячеек, а соответствующий размер сетки для решения уравнения Пуассона – порядка  $1024 \times 1024 \times 1024$  ячейки. Чтобы уровень шумов был приемлемым, необходимо не менее 100 частиц на ячейку расчетной области. Таким образом, получаем 6,4 млрд. частиц. Итоговый объем оперативной памяти составляет 311,3 Гбайт. Очевидно, что такая задача требует распараллеливания.

Некоторые пути решения проблемы распараллеливания методов частиц рассмотрены в [8]. Цель выбора параллельной реализации алгоритма – найти баланс между сложностью и эффективностью программы. Способ распараллеливания определяется характеристиками отдельных этапов алгоритма.

Алгоритм решения задачи представляет собой последовательность шагов, каждый из которых можно условно разделить на четыре этапа:

1. Лагранжев этап: сдвиг частиц во внутренней области под действием сил гравитации.
2. Вычисление плотности во внутренней области.
3. Эйлеров этап: решение уравнения Пуассона во внешней области.
4. Вычисление гравитационных сил во внутренней области.

Заметим, что эйлеров этап, занимающий в последовательном случае более 30 % вычислительной нагрузки, можно рассматривать независимо от всей остальной части алгоритма, так как с ней он связан только входом и выходом, а все вычисления на этом этапе происходят над отдельным блоком данных. Уравнение Пуассона на данном этапе решается методом БПФ. С точки зрения распараллеливания здесь нет принципиальных трудностей. Быстрое преобразование Фурье выполняется с помощью свободно распространяемой библиотеки FFTW. Способ разрезания массива также задается библиотекой: трехмерный массив разрезается по одному измерению и равномерно распределяется между всеми процессорами. Такая реализация эйлерова этапа является простой и в то же время очень эффективной.

Принципиальную трудность может составлять параллельная реализация остальных этапов задачи, так как приходится иметь дело с фиксированной пространственной сеткой и свободно движущимися в пространстве частицами. Существенной является необходимость расположения частиц и узлов сетки из одной области пространства моделирования в одном процессоре.

Рассмотрим три способа распараллеливания. Первый является наиболее очевидным подходом к распараллеливанию задач такого типа. Он основан на дублировании сетки по всем процессорам вычислительной системы и распределении частиц поровну между ними. Преимущество такого подхода – простота его реализации, а также получаемый в результате идеальный баланс загрузки процессоров. Недостатком же является плохая масштабируемость, вследствие чего этот способ применим только к небольшим задачам, у которых внутренняя сетка занимает небольшой объем памяти, как, например, в двумерном случае [3].

Второй способ распараллеливания таких задач – пространственная декомпозиция, т. е. разрезание расчетной области на несколько подобластей по числу процессоров и распределение соответствующим образом сеток и частиц. Его преимущество – хорошая масштабируемость, а существенный недостаток – возможный дисбаланс загрузки вычислительной системы. В процессе счета большинство частиц может собраться в одной подобласти, в результате соответствующий процессор окажется перегруженным, тогда как остальные будут простаивать.

Третий способ комбинирует первые два. Его суть состоит в следующем: область моделирования разрезается на непересекающиеся подобласти, каждая из которых обрабатывается группой из одного или нескольких процессоров. Соответствующая подобласти часть сетки дублируется, а частицы равномерно распределяются между всеми процессорами группы. Ожидается, что в результате уменьшения числа подобластей сократится число пересылок частиц, что положительно скажется на производительности. Алгоритм также хорошо масштабируется. Для данного способа реализовано статическое распределение процессоров по подобластям с учетом особенностей задачи: чем ближе подобласть к центру области, тем большим числом процессоров она обрабатывается.

Некоторую трудность для реализации составляет переход между различными этапами вычислений. Распределение сеточных значений между процессорами на лагранжевом и эйлеровом этапах различно, и требуется их перераспределение при переходе от одного этапа к другому.

На рис. 2 показано ускорение программы при использовании различных вариантов распараллеливания. Число частиц равно  $10^7$ , внутренняя сетка

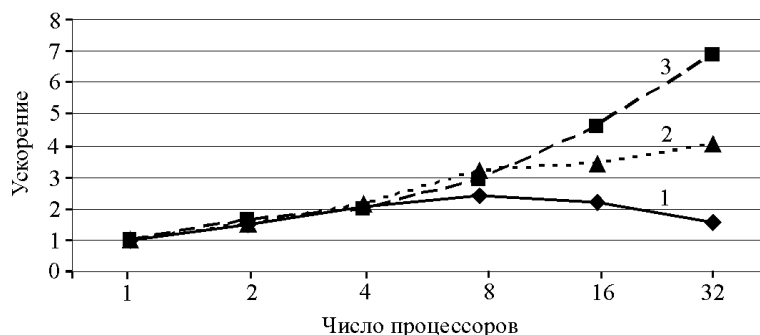


Рис. 2. Ускорение при различных вариантах распараллеливания: 1 – дублирование сетки, распределение частиц, 2 – разрезание сетки по числу процессоров, 3 – комбинированный способ

размером  $128 \times 128 \times 128$ , внешняя –  $256 \times 256 \times 256$  узлов. Время вычисления одного шага алгоритма в однопроцессорном варианте составило примерно 20 с. Программы запускались на суперкомпьютере МВС 1000М, построенном на процессорах Alpha 21264 667 МГц, коммуникационная среда – Myrinet 2000.

Видно, что вариант с дублированием сетки оказался самым неэффективным. Лучший результат показал второй вариант с пространственной декомпозицией области по числу процессоров. Комбинированный способ занял промежуточное по эффективности положение. Как показал анализ, источником значительного замедления в первом варианте послужило перераспределение сеточных значений между лагранжевым и эйлеровым этапами. Затраты на пересылки частиц оказались незначительными по сравнению с затратами на перераспределение сеток.

Исходя из результата, можно предложить два способа повышения производительности параллельных расчетов для задачи трехмерного моделирования динамики вращения пылевого облака методом частиц в ячейках:

1. Использовать согласованные сетки на различных этапах вычисления. Этот путь потребует применения другого алгоритма решения уравнения Пуассона, т. е. отказа от наиболее оптимальной текущей реализации.

2. Разработать более быстрый алгоритм перераспределения сеток между этапами. К сожалению, в худшем случае схема обменов имеет вид «каждый с каждым», а порядок взаимодействий является нетривиальным, поэтому такая задача представляется очень непростой.

**Заключение.** Разработан алгоритм и реализован комплекс параллельных программ для трехмерного моделирования динамики вращения пылевого облака в самосогласованном гравитационном поле в декартовых координатах методом частиц в ячейках. Наибольшее ускорение дала параллельная программа, основанная на декомпозиции расчетной области на равные части по числу процессоров. Для остальных способов распараллеливания источником замедления послужило большое число обменов при перераспределении сеток между различными этапами.

Автор выражает благодарность В. А. Вшивкову за обсуждение работы и полезные советы при ее подготовке.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Bagla J. S.** Cosmological N-body simulation: techniques, scope and status // Current Sci. 2005. **88**, N 7. P. 1088.
2. **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>
3. **Kuksheva E. A., Malyshkin V. E., Nikitin S. A. et al.** Numerical simulation of self-organisation in gravitationally unstable media on supercomputers // Proc. PaCT-2003. LNCS. Heidelberg: Springer-Verlag, 2003. **2763**. P. 354.
4. **Michel-Dansac L., Wozniak H.** Photometric and dynamic evolution of an isolated disc galaxy simulation // <http://xxx.lanl.gov/astro-ph/0404120>
5. **Хокни Р., Иствуд Дж.** Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987.
6. **Григорьев Ю. Н., Вшивков В. А., Федорук М. П.** Численное моделирование методами частицы-в-ячейках. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004.
7. **Snytnikov A. V., Vshivkov V. A.** A multigrid parallel program for protoplanetary disc simulation // Proc. PaCT-2005. LNCS. Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. **3606**. P. 457.
8. **Kraeva M. A., Malyshkin V. E.** Assembly technology for parallel realization of numerical models on MIMD-multicomputers // Future Generation Comp. Syst. 2001. **17**, N 6. P. 755.

*Поступила в редакцию 30 ноября 2005 г.*

---