

# Построение эффективного параллельного метода решения уравнения Пуассона для моделирования эволюции протопланетного диска \*

В.А. Вшивков, А.В. Снытников

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.

## 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 уравнения Власова-Лиувилля и уравнения Пуассона:

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

где  $f(t, \vec{r}, \vec{u})$  – функция распределения частиц пыли по скоростям,  $\vec{a}$  – ускорение частиц, которое определяется формулой  $\vec{a} = -\nabla\Phi$ ,  $\rho$  – объемная плотность вещества (сумма плотности газа и частиц),  $\Phi$  – гравитационный потенциал,  $\gamma$  – 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  $\rho$  в правой части уравнения Пуассона равна 0. Плотность вещества в плоскости диска  $\sigma$  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, затем решается уравнение Пуассона для определения гравитационного потенциала. Метод решения уравнения Пуассона является основной темой настоящей работы.

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). Также желательно избежать появления нефизических крестообразных структур, который были получены при моделировании галактических дисков в декартовых координатах [2].

---

\*Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, гранты 08-01-615 и 08-01-622.

В отношении размера сетки для решения уравнений Власова-Лиувилля и Пуассона можно привести следующую оценку. При изучении эволюции Солнечной Системы наиболее интересна область, находящаяся внутри орбиты Марса, которая в 50 раз меньше размера всей Солнечной Системы (если принять за таковой радиус орбиты Плутона). Если взять на длине орбиты Марса 10 узлов сетки, что минимально необходимо, то размер сетки по радиальной координате будет 500 узлов. Таким образом, исходя из того, что шаги сетки по всем трем координатам должны быть примерно равными, получаем оценку размера трехмерной сетки  $500^3$ .

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, исходя из приведенной оценки размера сетки минимально необходимо 25 миллионов частиц (по 100 на ячейку сетки в плоскости диска). Однако для исследования гравитационных неустойчивостей в протопланетном диске уровень шумов в 10 % является недопустимо большим. Таким образом необходимо проводить расчеты с сотнями миллионов частиц, что означает необходимость использования суперЭВМ.

В результате получаем следующие требования на методы решения уравнений Пуассона и Власова-Лиувилля:

- решение в цилиндрической системе координат
- способность решать задачи большой размерности за приемлемое время
- возможность эффективного распараллеливания

## 1.2. Выбор метода решения уравнения Пуассона

Итак, в задаче моделирования эволюции протопланетного диска область решения имеет вид кругового цилиндра

$$0 \leq r \leq R_M, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad 0 \leq z \leq Z_M,$$

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,  $\sigma(r, \varphi)$  - 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

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z}_{z \rightarrow +0} - \frac{\partial \Phi}{\partial z}_{z \rightarrow -0} = 2\pi\gamma\sigma \quad (2)$$

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:

$$\Phi(\vec{r}_0) = \int_S \frac{\sigma dS}{|\vec{r}_0 - \vec{r}|} \quad (3)$$

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

### 1.3. Аппроксимация уравнения Пуассона

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

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

$$i = 1, \dots, N_R - 1, \quad k = 1, \dots, N_\varphi \quad l = 2, \dots, N_Z - 1$$

Здесь  $N_R, N_\varphi, N_Z$  - число узлов по радиальной, угловой и z-координате соответственно. 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:

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

$$i = 1, \dots, N_R - 1, \quad k = 1, \dots, N_\varphi$$

В силу наличия периодических граничных условий

$$\Phi_{i-1/2,N_\varphi+1/2,l} = \Phi_{i-1/2,1/2,l}$$

$$\Phi_{i-1/2,-1/2,l} = \Phi_{i-1/2,N_\varphi-1/2,l}$$

## 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 поэтому хорошо поддается различным модификациям, ускоряющим его работу. Более того, при решении задачи об эволюции протопланетного диска метод ПВР может быть более эффективен, чем, как считается, более быстрые методы, такие как преобразование Фурье или циклическая редукция.

Дело в том, что метод ПВР работают намного быстрее при наличии близкого к решению начального приближения (в рассматриваемой задаче это 2-3, 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:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \hat{\Phi}_{i-1/2, k-3/2, l} + \frac{2}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \hat{\Phi}_{i-1/2, k-1/2, l} - \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \hat{\Phi}_{i-1/2, k+1/2, l} = \\
 & \frac{1}{h_r^2} \left[ \frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} \Phi_{i-3/2, k-1/2, l} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} \Phi_{i+1/2, k-1/2, l} \right] + \\
 & + \frac{1}{h_z^2} \left[ \Phi_{i-1/2, k-1/2, l-1} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \Phi_{i-1/2, k-1/2, l+1} \right] - \rho_{i-1/2, k-1/2, l}
 \end{aligned} \tag{6}$$

$$i = 1, \dots, N_R - 1, \quad k = 1, \dots, N_\varphi \quad l = 1, \dots, N_Z - 1$$

$$\Phi_{i-1/2, k-1/2, l}^n(m) = \omega \hat{P} h_i^n \Phi_{i-1/2, k-1/2, l}^n(m) + (1 - \omega) \Phi_{i-1/2, k-1/2, l}^{n-1}(m)$$

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

$$i = 2, \dots, N_R - 1, \quad k = 2, \dots, N_\varphi - 1 \quad l = 1, \dots, N_Z - 1 \tag{7}$$

здесь  $\omega$  - параметр релаксации. Для вычисления оптимального значения параметра релаксации  $\omega$  известна формула [4]

$$\omega_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}}$$

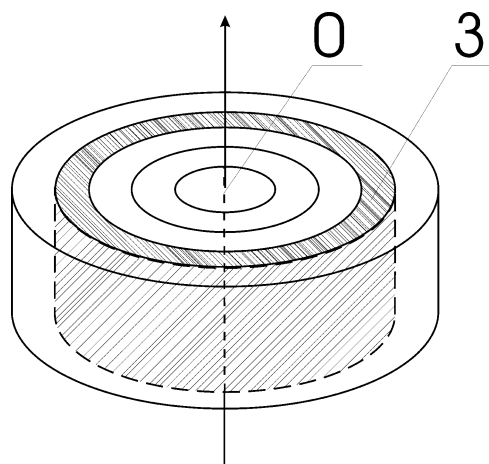
где  $\mu$  - коэффициент подавления ошибки соответствующего метода Якоби.

### 2.1.2. Радиальная декомпозиция области

Основное направление движение 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 ПЭ произвольным образом. Образующиеся подобласти не связываются с распределением частиц по ПЭ.

Для решения уравнения Пуассона область решения разделена на слои по радиусу для того, чтобы по возможности выровнять количество итераций при решении уравнения Пуассона в каждом ПЭ и использовать метод циклической прогонки в угловом направлении. Рисунок 2.1.2 показывает разделение цилиндрической области между пятью процессорами.



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

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 2 раза на трех процессорах и в 2.5 раза на 6 процессорах). Сверх 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

### 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.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_r^2} \left[ \frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} H_{i-3/2,l}(m) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} H_{i+1/2,l}(m) \right] + \frac{1}{h_z^2} \left[ d_l H_{i-1/2,l-1}(m) + u_l H_{i-1/2,l+1}(m) \right] - \\ & - \left[ \frac{2}{h_z^2} + \frac{2}{h_r^2} + 4 \sin^2 \frac{\pi m}{N_\varphi} \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \right] H_{i-1/2,l}(m) = R_{i-1/2,l}(m), \\ & i = 1, \dots, N_R - 1, \quad m = 0, \dots, N_\varphi - 1 \quad l = 1, \dots, N_Z - 1. \end{aligned} \tag{8}$$

Полученные системы линейных алгебраических уравнений 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 решение СЛАУ. После вычисления каждой из гармоник значения  $l = 0$  собираются в один процессор для выполнения обратного преобразования Фурье.

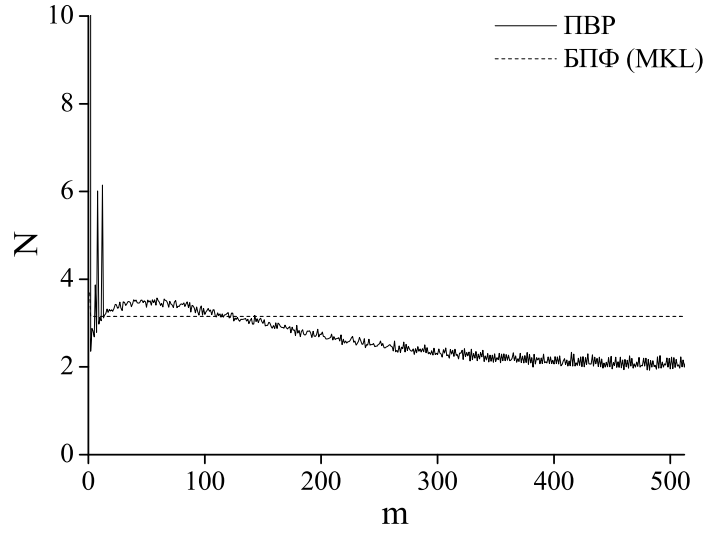
### 2.2.2. Свойства матрицы двумерной СЛАУ

Рассмотрим строку матрицы системы линейных уравнений для Фурье-гармоники с волновым числом  $m$

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

Таким образом, матрица системы является пятидиагональной. Видно, что для  $m = 0$  диагональный элемент матрицы  $A$  равен сумме недиагональных, то есть диагональное преобладание очень слабо выражено. Далее с увеличением  $m$  диагональный элемент растет. Таким образом, для коротковолновых гармоник (с большим  $m$ ) имеется выраженное диагональное преобладание, в то время как для длинноволновых гармоник диагональное преобладание слабое. Это приводит к медленной сходимости при решении СЛАУ для 0-й гармоники итерационными методами или к потере точности или даже численной неустойчивости при использовании прямых методов.

на рисунке 2.2.2 показано число итераций метода ПВР для различных фурье-гармоник. Число итераций для 0-й гармоники более 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 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  $N_R \times N_Z = 500 \times 512$ , расчет проведен на процессоре Itanium2.



**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.

### 2.2.3. Расчет Фурье-гармоники методом ПВР

Метод последовательной верхней релаксации был реализован в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{i-1/2,l}^n(m) = & \left[ \frac{2}{h_z^2} + \frac{2}{h_r^2} + \frac{4}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} \sin^2 \frac{\pi m}{N_\varphi} \right]^{-1} \times \\ & \times \left\{ -R_{i-1/2,l}(m) + \frac{1}{h_r^2} \left[ \frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} H_{i-3/2,l}^n(m) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} H_{i+1/2,l}^{n-1}(m) \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{h_z^2} [d_l H_{i-1/2,l-1}^n + u_l H_{i-1/2,l+1}^{n-1}] \right\} \end{aligned} \quad (9)$$

$$H_{i-1/2,l}^n(m) = \omega \hat{H}_{i-1/2,l}^n(m) + (1 - \omega) H_{i-1/2,l}^{n-1}(m)$$

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

здесь  $\omega$  - параметр релаксации.

Для приведенных расчетов использовано подобранное приближенное значение  $\omega_0 = 1.83$ .

Для метода ПВР число итераций зависит от номера гармоники как показано на рисунке 2.2.2. Итерации прекращались при невязке

$$\varepsilon < 10^{-6} \quad \varepsilon = \max_{i,k,l} |\Phi_{i-1/2,k+1/2,l}^n - \Phi_{i-1/2,k+1/2,l}^{n+1}|$$

Дальнейшее ее уменьшение нецелесообразно, так как граничные условия для уравнения Пуассона (поверхностная плотность вещества  $\sigma$ ) 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  $z$ -ординате 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  $z$ -ординате на  $N_Z$  и может оказаться дробным, как на рисунке 2.2.2.

Как видно из рисунка 2.2.2, 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 0-й гармоники более 500, поэтому 0-я гармоника на рисунке 2.2.2 не показана. Таким образом, именно 0-я 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 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 0-й 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 рисунке 2.2.2).

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  $z$

$$F_{i-1/2}(m, k) = \sum_{j=0}^{N_Z-1} H_{i-1/2,j}(m) p_j \cos\left(\frac{\pi k j}{N_Z}\right)$$



$$Q_{i-1/2}(m, k) = \sum_{j=0}^{N_Z-1} R_{i-1/2,j}(m) p_j \cos\left(\frac{\pi k j}{N_Z}\right)$$

$$i = 2, \dots, N_R - 1$$

$$p_j = \begin{cases} 0.5 & j = 0, N_Z - 1 \\ 1 & j = 1, \dots, N_Z - 2 \end{cases}$$

Таким образом, система линейных алгебраических уравнений для каждой угловой Фурье-гармоники с номером  $m$  (8) заменяется на систему из  $N_\varphi \times N_Z$  независимых друг от друга трехдиагональных СЛАУ:

$$\frac{1}{h_r^2} \left[ \frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} F_{i-3/2}(m, k) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} F_{i+1/2}(m, k) \right]$$

$$- \left[ \frac{2}{h_r^2} + 4 \sin^2 \frac{\pi m}{N_\varphi} \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} + \frac{4}{h_Z^2} \sin^2 \frac{\pi k}{2N_Z} \right] F_{i-1/2}(m, k) = Q_{i-1/2}(m, k), \quad (10)$$

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

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 решение совершенно неизвестно, рисунок 2.3.2. 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 4 порядка быстрее (569 секунд для метода ПВР и 0.11 секунды для метода преобразования Фурье), как видно из рисунка 2.3.2.

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  $N_R \times N_Z = 500 \times 512 \times 512$ . Из рисунка 2.3.2 видно, что при помощи процедуры из библиотеки MKL решение происходит быстрее, чем с использованием процедуры из библиотеки NAG.

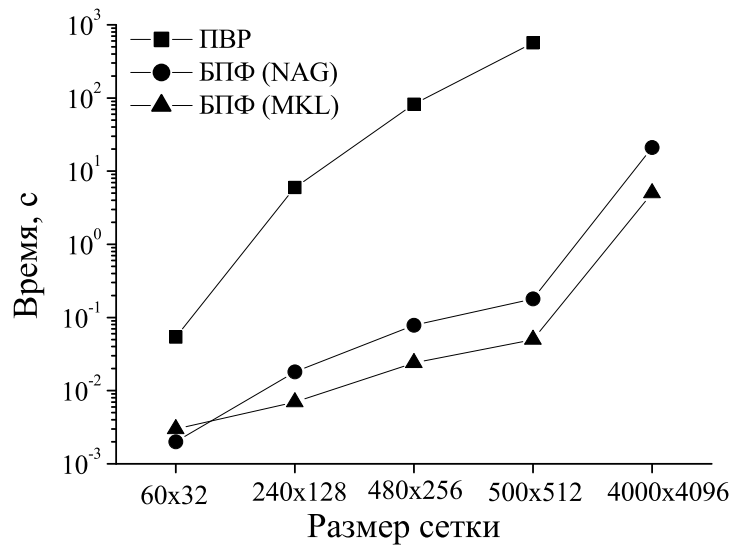
Разница во времени счета может объясняться оптимизацией библиотеки MKL под архитектуру процессора Itanium2. Процедура FFTC библиотеки NAG, осуществляющая быстрое преобразование Фурье, была использована в виде исходного текста на языке Фортран, а не в виде откомпилированных двоичных файлов, как это было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

Тем не менее, основное преимущество (3 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 0-й гармоники потенциала методом преобразования Фурье сокращается в 10000 раз. Таким образом, 0-я гармоника более не вызывает 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, 64 процессорах



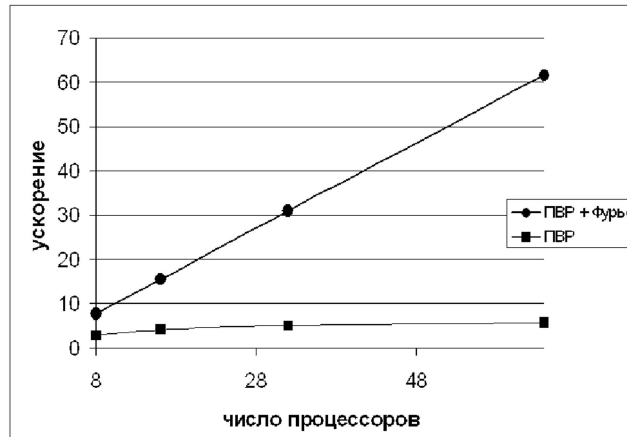
**Рис. 3.** Сравнение времени расчета 0-й гармоники потенциала с помощью метода ПВР и метода преобразования Фурье. Процедура, реализующая быстрое преобразование Фурье была взята из библиотек NAG и MKL. Размер сетки для отдельной гармоники  $N_R \times N_Z = 500 \times 512$ , расчет проведен на процессоре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

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 рисунке 3. 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 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 MIMD - 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 задач о развитии в среде физической неустойчивости.



**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. (круги). В другом случае, все гармоники вычисляются методом ПВР (квадраты).

## Литература

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, номер 3, том 7. 2002, с.72-84.
2. Miller R. H. Validity of Disk Galaxy Simulations. // J. of Comp. Phys. 1976, V.21, p.400.
3. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. "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>
8. Intel®Math Kernel Library 10.0 - Overview. <http://www.intel.com/cd/software/products/asmo-na/eng/307757.htm>