

Параллельный код для трехмерного моделирования процессов космической газодинамики*

М.А. Еремин, В.Н. Любимов

Разработан параллельный код для численного моделирования процессов космической газодинамики с учетом тепловых процессов. Представлены результаты трехмерного моделирования с высоким разрешением неупругих столкновений облаков межзвездного газа H I при различных наборах начальных параметров. Проведено детальное исследование масштабируемости программы, в результате которого установлено, что эффективность распараллеливания составляет 70–90 %, в зависимости от параметров задачи.

1. Введение

Моделирование процессов космической газодинамики всегда являлось чрезвычайно ресурсоемкой сферой применения численных расчетов. Процессы, протекающие в астрофизических системах являются трехмерными, и как правило, существенно нестационарными. Исследование подавляющего числа астрофизических задач может быть выполнено только численно в силу ограниченности аналитических методов. Отметим, что физические условия в астрофизических системах часто приводят к образованию ударных волн и сильной турбулизации межзвездной среды. Для адекватного моделирования астрофизических систем необходимо использовать трехмерные численные схемы и высокое пространственное разрешение.

Одной из классических задач космической газодинамики является задача о столкновении облаков H I в многофазной межзвездной среде [1]. Укажем на тот факт, что только при большом пространственном разрешении возможно наблюдать развитие гидродинамических и тепловых неустойчивостей, играющих решающую роль в разрушении холодных плотных облаков H I. С учетом трехмерности задачи это приводит к высоким требованиям к производительности вычислительных систем и делает невозможным решение данной задачи без использования технологий параллельных вычислений.

Некоторые физические аспекты столкновений облаков в рамках достаточно грубых приближенных моделей впервые были рассмотрены в работах [2, 3]. Изучение столкновений облаков с использованием численного моделирования было проведено целым рядом авторов (см., например, работы [4–6]). Наиболее полное исследование столкновений облаков в двумерных численных моделях приведено в работах [7, 8], в том числе, и с учетом магнитного поля. Тем не менее, целый ряд вопросов остался без рассмотрения, особенно в трехмерном случае.

Целями нашей работы являются:

1. Разработка и реализация трехмерной параллельной TVD схемы для моделирования процессов космической газовой динамики.
2. Применение разработанного кода для исследования неупругих столкновений облаков H I в многофазной межзвездной среде при различных начальных условиях, включая нелобовой характер столкновений и неидентичность сталкивающихся облаков.
3. Исследование масштабируемости параллельного кода и выявление основных причин издержек распараллеливания.

*Работа поддержана грантами РФФИ N07-02-01204, N09-02-97021 и ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” (2009НК-21(7)).

2. Постановка задачи

2.1. Основные уравнения

Процесс столкновения облаков атомарного водорода H I, помещенных в теплую межзвездную среду, может быть описан уравнениями ньютоновской газовой динамики в одножидкостном приближении. Предположим, что газ является идеальным и политропным с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$. В силу того, что масштаб Джинса намного больше размеров облаков $\lambda_J \gg R_c$, эффектами самогравитации газа пренебрегаем. Следует отметить, что на стадии компрессии облака испытывают существенное сжатие, что приводит к увеличению плотности, так что масштаб Джинса становится сравнимым с характерным вертикальным размером облака. Тем не менее, в данной работе для упрощения модели самогравитация газа не рассматривается.

Система уравнений газовой динамики с учетом тепловых процессов и теплопроводности записывается в виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ([E + p]\mathbf{u}) = \nabla [k(T)\nabla T] - L(p, n). \quad (3)$$

Здесь ρ , p , $\mathbf{u} = \{u, v, w\}$ – плотность, давление и вектор скорости газа соответственно, $E = \rho \left(e + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right)$ – объемная энергия, $k(T)$ – коэффициент теплопроводности, $L(p, n) = \Lambda(T)n^2 - \Gamma(T)n$ – функция тепловых потерь, $\Lambda(T)$ – функция объемного охлаждения, $\Gamma(T)$ – функция объемного нагрева. Для идеального газа удельная энергия определяется выражением: $e = \frac{p}{\rho(\gamma-1)}$. Связь между давлением и температурой задается уравнением состояния: $p = nk_B T$, где k_B – постоянная Больцмана.

Функция охлаждения в наших численных моделях принималась отвечающей стандартному химическому составу межзвездной среды в окрестности Солнца (см., например, [9–11]). Расчеты показывают, что функция нагрева слабо зависит от температуры, поэтому мы полагали ее постоянной $\Gamma = 1,6 \cdot 10^{-25}$ эрг/с.

Коэффициент теплопроводности учитывает как атомную, так и электронную теплопроводности, зависимость теплопроводности от температуры имеет следующий вид:

$$k(T) = \begin{cases} k_a T^{1/2} / (1 + \sigma_a), & \text{при } T < 10^4 \text{ K}, \\ k_e T^{5/2} / (1 + \sigma_e), & \text{при } T \geq 10^4 \text{ K}. \end{cases} \quad (4)$$

При высоких температурах возникает эффект насыщения теплового потока, что в формулах (4) учитывается через величины σ_a и σ_e , представляющие отношение классического теплового потока к насыщенному [15–17]:

$$\sigma_a = \frac{q_{\text{classic}}}{q_{\text{sat}}} = \frac{k_a T^{1/2} |\nabla T|}{5\rho(k_B T/m_0)^{3/2}}, \quad (5)$$

$$\sigma_e = \frac{q_{\text{classic}}}{q_{\text{sat}}} = \frac{k_e T^{5/2} |\nabla T|}{5\rho(k_B T/m_0)^{3/2}}, \quad (6)$$

где m_0 – масса протона, $k_a = 2,0 \cdot 10^{-3}$ эрг/(с см $\text{K}^{3/2}$) и $k_e = 5,6 \cdot 10^{-7}$ эрг/(с см $\text{K}^{7/2}$) – коэффициенты атомной и электронной теплопроводности соответственно.

Система уравнений газовой динамики (1)–(3) записывалась в безразмерной форме с использованием нескольких базисных величин. Перечислим наиболее важные размерные

параметры задачи: $L_0 = 1$ пк – характерный пространственный масштаб, $T_0 = 10^4$ К – температура, $n_0 = 0,1 \text{ г/см}^3$ – концентрация, $c_{s0} \simeq 12$ км/с – адиабатическая скорость звука, $t_0 \approx 10^5$ лет – характерное время задачи.

Важное значение имеют равновесные параметры использованной физической модели. Укажем числовые значения следующих параметров, отвечающих тепловому равновесию: равновесная температура теплой фазы $T_{eq1} = 8922$ К; равновесная температура холодной фазы $T_{eq2} = 62,5$ К; концентрации $n_0 = 0,1 \text{ г/см}^3$ соответствует равновесное давление межзвездной среды $p_{eq}/k_B = 892,2 \text{ К/см}^3$.

2.2. Разработка и реализация кода

2.2.1. Численная схема

Для компьютерного моделирования неупругих столкновений облаков в межзвездной среде мы реализовали явную численную схему для системы (1)–(3) в декартовой системе координат. При построении численной схемы использовался метод расщепления по физическим процессам, согласно которому численное решение строится как решение уравнений, описывающих различные физические процессы.

Гидродинамические процессы, описываемые левой частью уравнений (1)–(3), представляют собой уравнения в частных производных гиперболического типа, для которых разработаны схемы неубывания полной вариации TVD [13], эффективно подавляющие нефизические осцилляции численного решения на скачках. Реализованная пространственно-нерасщепленная TVD схема относится к типу MUSCL [12], имеет третий порядок аппроксимации по пространству в областях гладкого течения и первый на скачках. За счет применения алгоритмов пересчета типа Рунге-Кутты, реализованная численная схема обладает вторым порядком по времени.

Учет тепловых процессов, описываемых правой частью системы (1)–(3), сводится к коррекции тепловой энергии на каждом временном слое после расчета гидродинамических параметров течения. Изменение внутренней энергии за счет тепловых процессов описывается уравнением на внутреннюю энергию, которое решалось численно как с помощью метода подшагов, так и с помощью метода, предложенного в работе [7].

2.2.2. Распараллеливание

Распараллеливание численного кода производилось с использованием стандарта MPI. Расчетная область равномерно распределялась между процессорами с последующим обменом границами после каждого гидродинамического шага. Деление на подобласти производилось вдоль одной оси прямоугольной сетки – деление на “слои” (рисунок 1). Укажем еще два варианта деления – это деление в направлении двух координат – деление на “столбцы”, и деление вдоль трех координат – деление на “кубы”. Вариант деления на “слои” был выбран для уменьшения количества вызовов функций обмена сообщениями, которые, как известно, приводят к дополнительным издержкам, не зависящим от объема пересылаемых данных.

При таком разбиении на подобласти стало возможным производить обмен границами только в два этапа. Сначала проводится обмен данными на всех нечетных границах одновременно – между 1-м и 2-м, 3-м и 4-м, 5-м и 6-м и т. д. процессами. Затем обмениваются границами 2-й и 3-й, 4-й и 5-й, 6-й и 7-й и т. д. процессы. Это приводит к тому что время, затрачиваемое на обмен границами, в идеальном случае не будет зависеть от количества процессоров, что положительно скажется на масштабируемости программы. В реальности при увеличении количества процессоров издержки все же растут, что связано с увеличением нагрузки на соединительную шину кластера. Такой способ обмена границами указывает на целесообразность использования разбиения расчетной области на “слои”, так как при

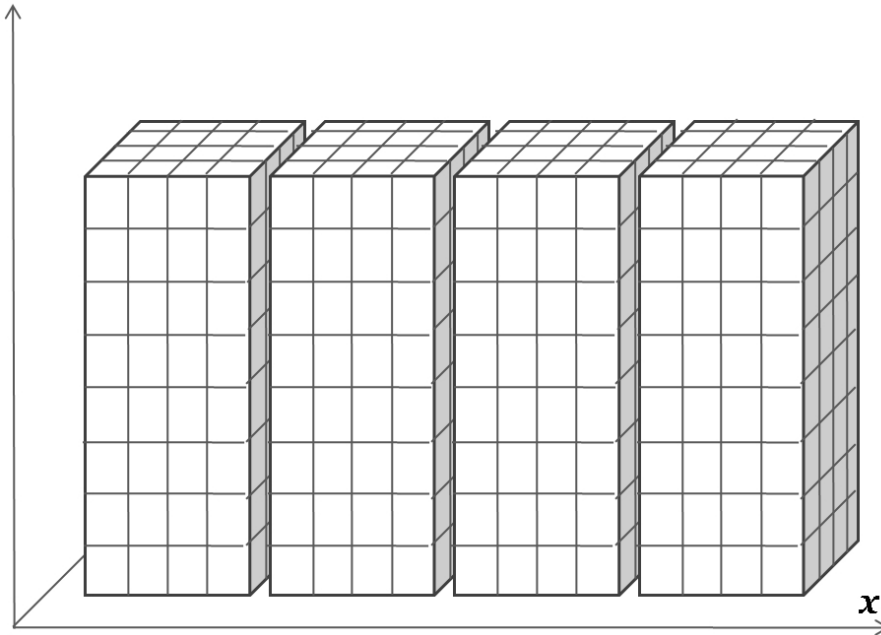


Рис. 1. Схема распределения расчетной области между процессорами

разбиении, скажем, на “кубы”, необходимо как минимум шесть этапов обмена границами (по количеству стыкующихся с соседними процессами граней у каждой подобласти).

Отметим также, что в коде проведена оптимизация распараллеливания – используется неблокирующая пересылка данных стандарта MPI [14], что делает возможным продолжение расчета в некоторой части подобласти во время обмена данными между процессами. Это особенно актуально при использовании кластеров с медленной соединительной сетью, как, например, у нетеряющей популярности недорогой вычислительной системы, состоящей из персональных компьютеров, объединенных локальной сетью.

Объем пересылаемых данных зависит от размера расчетной области и пропорционален N^2 (где N – количество узлов вдоль одной оси, N^3 – количество ячеек расчетной области). Таким образом, с ростом размера задачи время, затрачиваемое на обмен границами, растет гораздо медленнее времени расчета газодинамических процессов, которое пропорционально N^4 , что приводит к повышению эффективности.

2.3. Начальные и граничные условия

Во всех численных моделях предполагалось, что в начальный момент времени температура и концентрация газа, отвечающих теплой фазе равны $T_w = 10^4$ К и $n_w = 0,1$ г/см³, температура облаков $T_c = 80$ К, концентрация газа в них в 100 раз больше, чем в межоблачной среде $n_c = 10$ г/см³. Кроме того, в начальный момент теплая и холодная фазы межзвездной среды находятся в состоянии механического равновесия, то есть $p_w = p_c$. Облака начинают движение навстречу друг другу с относительным числом Маха $M = u_c/c_w$, где c_w – адиабатическая скорость звука в межоблачной среде, u_c – скорость движения облака.

Радиус сталкивающихся облаков варьировался от 0,5 пк до 1,5 пк. Нами были рассмотрены различные варианты столкновений: лобовые столкновения идентичных облаков, лобовые столкновения неидентичных облаков и нелобовые столкновения.

3. Результаты

3.1. Моделирование

Расчеты проводились с разрешением до 800^3 ячеек. Основной моделью является модель трехмерного лобового столкновения облаков Н.И. На рисунке 2 показаны основные стадии эволюции: а) стадия компрессии или сжатия, когда ударные волны, образовавшиеся при столкновении, распространяются наружу; б) стадия перерасширения, на которой волны разрежения, распространяясь назад, формируют центральную область низкого давления и плотности, на этой стадии образуется выброс, подверженный действию неустойчивостей типа Кельвина-Гельмгольца; в) стадия коллапса, когда расширение останавливается давлением внешней окружающей среды. На этой стадии развивается неустойчивость Релея-Тейлора; д) стадия разрушения облаков.

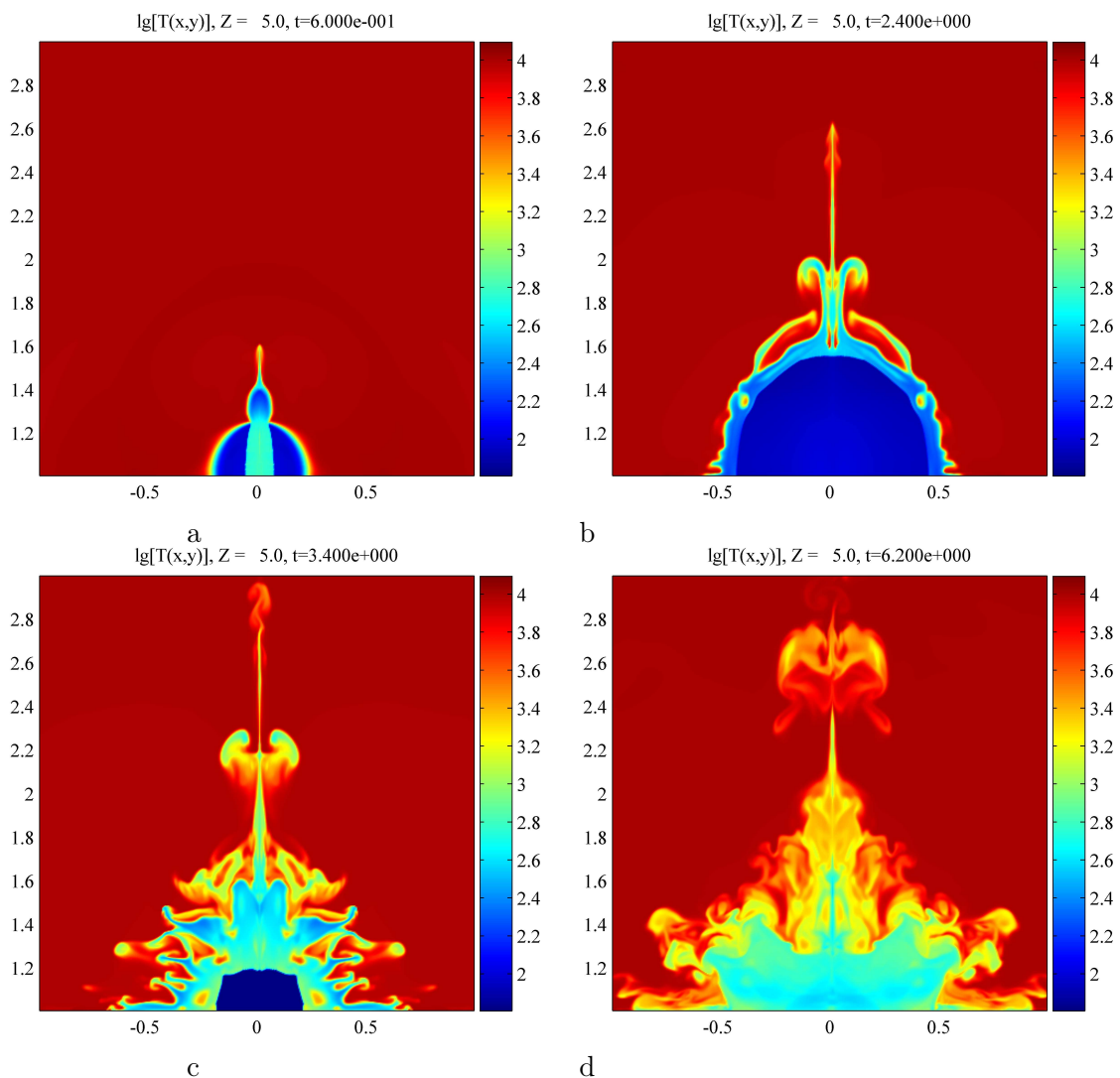


Рис. 2. Распределение логарифма температуры ($\lg T/T_0, T_0 = 1 K$) для трехмерной модели лобового столкновения идентичных облаков (сечение плоскостью $Z = 0$)

Следует отметить, что для адекватного моделирования лобовых столкновений идентичных облаков необходимо использовать модели с высоким пространственным разрешением (не менее 50 ячеек на радиус облака). Только в этом случае возможно образование filamentных структур, приводящих к фрагментации облаков. В противном случае происходит сильная деградация численного решения, вследствие чего в результате слияния двух стал-

кивающих облаков возможно формирование нового облака, что как раз и наблюдалось в работе [7].

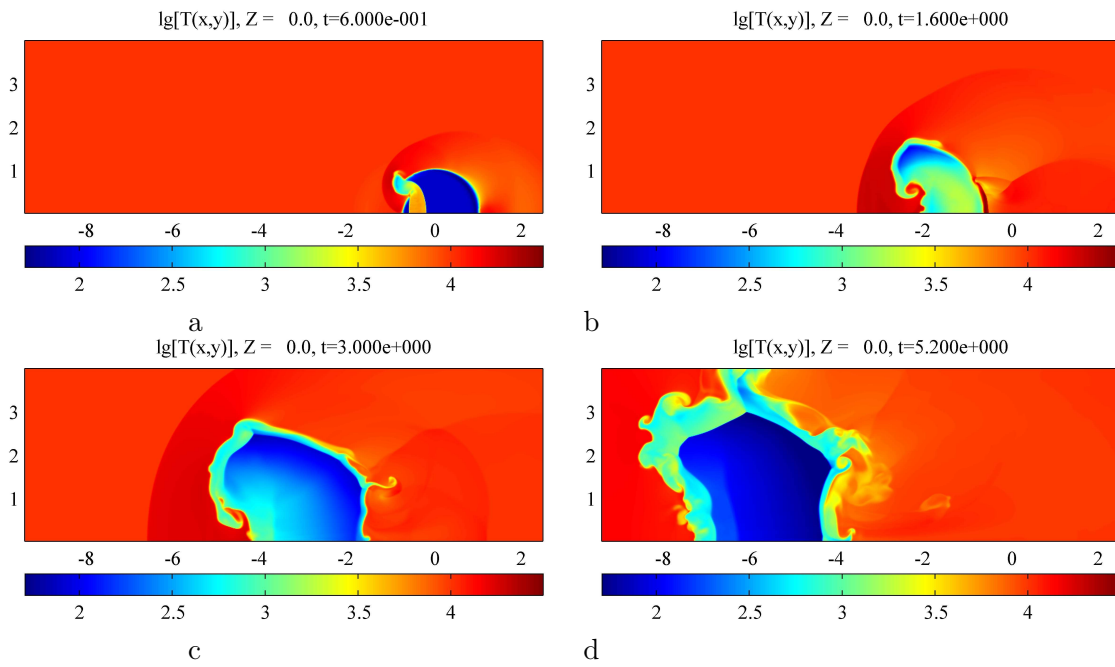


Рис. 3. Распределение логарифма температуры ($\lg T/T_0$, $T_0 = 1 K$) для трехмерной модели лобового столкновения неидентичных облаков (сечение плоскостью $Z = 0$)

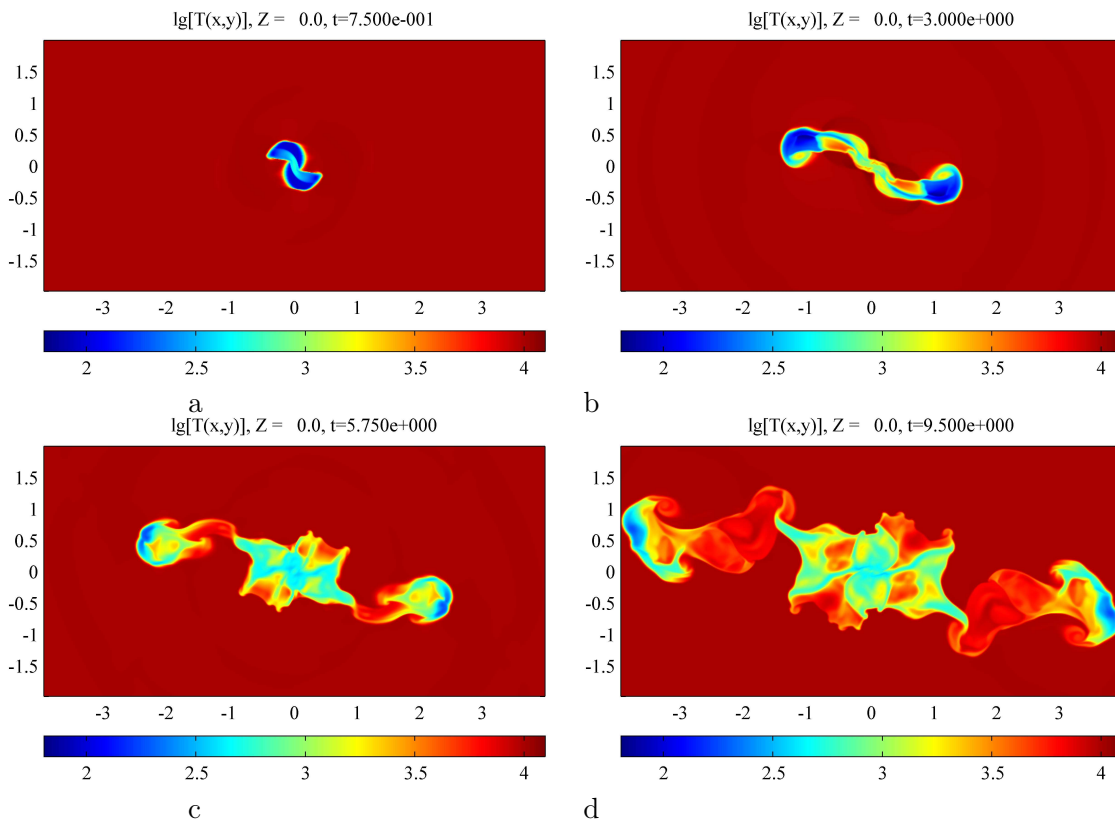


Рис. 4. Распределение логарифма температуры ($\lg T/T_0$, $T_0 = 1 K$) для трехмерной модели нелобового столкновения идентичных облаков (сечение плоскостью $Z = 0$)

На рисунке 3 показаны несколько стадий лобового столкновения двух неидентичных облаков с радиусами $R_{c1} = 0,5$ пк и $R_{c2} = 1,0$ пк. В результате столкновения облаков происходит интенсивное развитие гидродинамических неустойчивостей, турбулизирующих среду. На основании проведенных нами численных экспериментов можно заключить, что столкновения неидентичных облаков приводят к их полному разрушению и переводу газа из холодной фазы в теплую.

Также интерес представляет трехмерная модель нелобового столкновения облаков (рисунки 4). Идентичные облака с радиусом 0,5 пк движутся навстречу друг другу ($M_1 = M_2 = 1,5$), таким образом, что центры облаков смещены на расстояние, равное одному радиусу. В результате столкновения образуются макроскопические вихревые филаменты с характерным размером несколько парсек.

3.2. Масштабируемость

Все расчеты и тесты проводились на сорока ядерном кластере, состоящем из пяти узлов, объединенных высокоскоростной шиной InfiniBand. Каждый узел содержит по два процессора Intel Xeon и 8 ГБ оперативной памяти.

Эффективность программы определялась как отношение ускорения программы S при использовании p процессоров к числу процессоров:

$$E = \frac{S_p}{p}. \quad (7)$$

Ускорение программы вычисляется как отношение времени выполнения параллельной программы T_p ко времени выполнения последовательной программы T_1 :

$$S_p = \frac{T_p}{T_1}. \quad (8)$$

Для измерения времени, затрачиваемого на обмен границами в тестах использовалась версия программы с блокирующей пересылкой данных. Результаты тестов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Зависимость эффективности программы от количества процессоров

Количество процессоров	Время выполнения (сек)	Время обмена границами (сек)	Доля времени обмена границами (%)	Эффективность программы (%)
1	12811,5	0	0	100
4	3285	8,4	0,26	97,5
20	733	21,1	2,88	87,39
40	470	45,85	9,76	68,15

Анализ данных, приведенных в таблице 1 показывает, что время, затрачиваемое на пересылку данных, значительно растет с увеличением количества используемых процессоров, чего в идеале не должно наблюдаться исходя из реализованного алгоритма обмена границами (см. пункт 2.2.2). Очевидно, это вызвано косвенными издержками, возникающими при параллельных расчетах. Все же даже такой рост времени обмена границами не объясняет чрезвычайно сильное падение эффективности программы с увеличением количества используемых процессоров. Отметим, что на сорока ядрах эффективность составляет

менее 70%, издержки же на обмен данными не превышают 10%. Очевидно, существуют другие механизмы, не связанные с обменом границами, или возрастанием нагрузки на шину InfiniBand, но также влияющие на скорость счета программы, и возрастающие с увеличением количества используемых процессоров. Одной из таких причин может являться нехватка скорости внутренней шины данных для обеспечения одновременного доступа к оперативной памяти сразу всеми восемью процессорами вычислительного узла. В этом случае скорость счета программы будет зависеть от количества используемых на одном узле ядер. Для проверки данного предположения были проведены тесты скорости выполнения программы при одинаковом количестве процессов, но при различном их распределении по узлам кластера (см. таблицу 2).

Таблица 2. Зависимость времени счета от загруженности узлов

Количество используемых узлов	Количество используемых ядер на каждом узле (из 8)	Время выполнения (сек)
1	8	4324
2	4	2538
4	2	2620

Во всех тестах количество используемых ядер равно восьми, но они располагаются на одном, двух или четырех узлах. Таким образом, сохраняя суммарную производительность вычислительной системы, мы можем оценить влияние архитектуры кластера. Как видно, время счета меняется до двух раз, причем максимальное время расчета достигается при использовании всех ядер одного узла, что подтверждает наше предположение о причинах замедления выполнения программы.

Для исключения влияния архитектуры конкретной вычислительной системы на эффективность кода были произведены тесты производительности при одинаковом заполнении узлов кластера, результаты которых представлены в таблице 3.

Таблица 3. Эффективность программы при полной загруженности используемых вычислительных узлов

Количество процессоров	Время выполнения (сек)	Время обмена границами (сек)	Доля времени обмена границами (%)	Эффективность программы (%)
1	32082	0	0	100
8 (1 узел)	4359	37,72	0,87	92
16 (2 узла)	2095	112,21	5,36	95,71
24 (3 узла)	1447	94,15	6,51	92,38
32 (4 узла)	1162	123,27	10,61	86,27
40 (5 узлов)	921	93,67	10,17	87,09

Следует обратить внимание на то, что абсолютное время обмена данными практически не меняется, что говорит о эффективности алгоритма параллельного обмена границами в

два этапа (см. пункт 2.2.2). Также следует заметить, что небольшое падение эффективности (порядка 10%), полностью соответствует затратам времени на пересылку данных. Это означает, что в данном тесте нам действительно удалось исключить влияние архитектуры кластера, и мы можем наблюдать реальную эффективность реализации параллельного алгоритма. Наглядное сравнение результатов двух тестов приведено в виде графиков на рисунке 5.

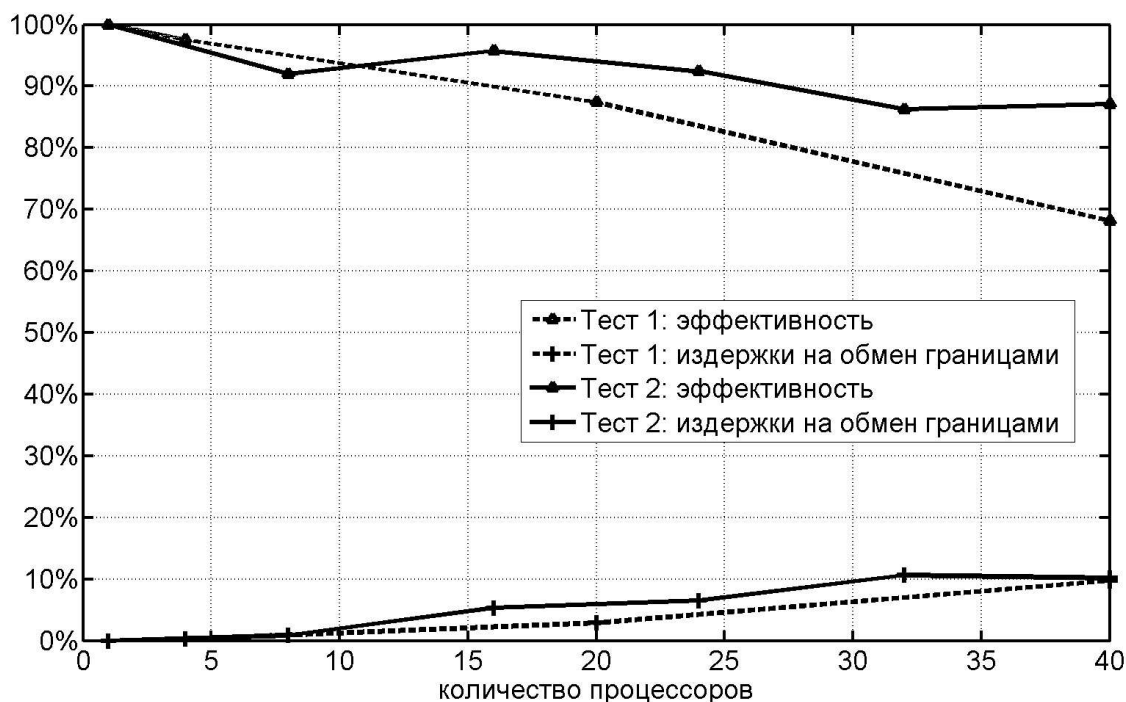


Рис. 5. Масштабируемость программы: Тест 1 – с использованием всех узлов кластера (таблица 1) Тест 2 – при полном использовании части вычислительных узлов (таблица 3)

Следует упомянуть, что для расчетов (в отличие от тестов) используется версия программы с неблокирующей пересылкой данных, что фактически позволяет исключить издержки на обмен границами, и приводит к более высокой масштабируемости разработанного кода. К сожалению, технические возможности не позволили нам провести тесты с более чем сорока ядрами.

4. Основные выводы

В заключение нашей работы сформулируем основные выводы:

1. Разработана и реализована трехмерная параллельная схема для численного моделирования процессов космической газодинамики.
2. Разработанный код обладает хорошей масштабируемостью и высокой эффективностью (порядка 90%).
3. Моделирование столкновений облаков H I с использованием полученного кода показывает, что вне зависимости от характера столкновения происходит разрушение облаков с образованием филаментных структур.

Литература

1. McKee C.F., Ostriker J.P. A theory of the interstellar medium - Three components regulated by supernova explosions in an inhomogeneous substrate. // *The Astrophysical Journal*, 1977, 218, pp. 148-169.
2. Stone M.E. Collisions Between HI Clouds. I. One-Dimensional Model. // *The Astrophysical Journal*, 1970, 159, p. 277.
3. Stone M.E. Collisions Between HI Clouds. II. Two-Dimensional Model. // *The Astrophysical Journal*, 1970, 159, p. 293.
4. Hausman M.A, Collisional mergers and fragmentation of interstellar clouds. // *The Astrophysical Journal*, 1981, 245, pp. 72-91.
5. Gildea D.L. Clump collisions in molecular clouds - Gravitational instability and coalescence. // *The Astrophysical Journal*, 1984, 279, pp. 335-349.
6. Lattanzio J.S, Monaghan J.J., Pongracic H., Scywertz M.P. Interstellar Cloud Collisions. // *Monthly Notes of the Royal Astronomical Society*, 1985. – V. 215, P. 125.
7. Miniati F., Jones T.W., Ferrara A., Ryu D. Hydrodynamics of Cloud Collisions in Two Dimensions: The Fate of Clouds in a Multiphase Medium. // *The Astrophysical Journal*, 1997, 491, p. 216.
8. Miniati F., Ryu D., Ferrara A., Jones T.W. Magnetohydrodynamics of Cloud Collisions in a Multiphase Interstellar Medium. // *The Astrophysical Journal*, 1999, 510, pp. 726-746.
9. Spitzer L. Physics of fully ionized gases. // New York: Interscience, 1962.
10. Марочник Л. С., Сучков А. А. Галактика. // М.: Наука, 1984.
11. Vochkarev N. G. Основы физики межзвездной среды. // М: МГУ, 1991.
12. van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second order sequel to Godunov's methods. // *Journal of Computational Physics*, 1979, 32, №1, pp. 101-136.
13. Harten A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. // *Journal of Computational Physics*, 1983, 49, №3, p. 357.
14. Антонов А.С., Параллельное программирование с использованием технологии MPI. // -М.: МГУ, 2004, 71с.
15. Cowie L. L., McKee C. F. The evaporation of spherical clouds in a hot gas. I - Classical and saturated mass loss rates. // *The Astrophysical Journal*, 1977, 211, pp. 135-146.
16. Balbus S. A., McKee C. F. The evaporation of spherical clouds in a hot gas. III - Suprathermal evaporation. // *The Astrophysical Journal*, 1982, 252, pp. 529-552.
17. Giuliani J. On the dynamics in evaporating cloud envelopes. // *The Astrophysical Journal*, 1984, 277, pp. 605-614.
18. Ricotti M., Ferrara A., Miniati F. Energy Dissipation in Interstellar Cloud Collisions. // *The Astrophysical Journal*, 1997, 485, p. 254.
19. Gregory R. Andrews, Foundations of Multithreaded, Parallel, and Distributed Programming. // Addison-Wesley, 2000