

РЕШЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ ГРАВИТАЦИОННОЙ ФИЗИКИ НА СУПЕРЭВМ

Э.А. Кукшева, В.Н. Снытников

В астрофизике и астрокатализе [1] широко используется математическое моделирование с проведением вычислительных экспериментов на суперкомпьютерах. Одно из направлений моделирования связано с задачами бесстолкновительной гравитационной физики с различными методами решения системы интегро-дифференциальных уравнений. Среди них важное место принадлежит методу частица-сетка PM. В этом методе на введенной сетке по распределению в пространстве большого числа частиц вычисляется плотность вещества. Затем из решения уравнения Пуассона находятся сеточные значения потенциала и соответствующие силы, действующие на частицы. Следом из уравнений движения для частиц определяются их новые координаты. Тем самым, распределение частиц в пространстве изменяется под действием самосогласованного поля. Практически метод частиц предполагает математическое моделирование из физически первых принципов.

В расчетах изолированных физических систем с проявлениями гравитационных неустойчивостей размер сеточного шага должен быть существенно меньше джонсовской длины, а она как правило значительно меньше общего размера физической системы. Отсюда возникает требование к размерности вычислительной сетки всей системы $\sim 1000 \times 1000 \times 1000$ узлов. Для обеспечения приемлемого уровня флуктуаций плотности общее количество частиц для указанной сетки оценивается в $10e11$. В принципе, современные суперкомпьютеры с 5000 процессорами и около 1Гб ОП на процессор, имеют технические ресурсы для решения задач с указанными параметрами. Это позволит воспроизводить детальные функции распределений в многомерных фазовых пространствах. Но для этого необходимо создать высокоэффективные параллельные алгоритмы и программы.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Задача гравитационной физики описывается системой из уравнения из кинетического уравнения Власова-Лиувилля и уравнения Пуассона. Уравнение Власова-Лиувилля описывает динамику многих тел без столкновений, а уравнения Пуассона - потенциал гравитационного поля. Моделируемая гравитирующая система является изолированной, поэтому граничное условие для уравнения Пуассона состоит в нулевом значении потенциала на бесконечности.

В начальный момент времени частицы располагаются в расчетной области. Расположение может быть произвольным, и, в частности, в виде плоского диска с осесимметричным распределением поверхностной плоскости. Задание начальных скоростей частиц определяет вращение диска вокруг центра масс.

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Задача решается в декартовой системе координат. Для решения кинетического уравнения Власова-Лиувилля используется метод частиц-в-ячейках. В пространственной области в виде параллелепипеда вводится сетка, которая делит область на ячейки. Модельные частицы, в общем случае с собственной приписанной им массой и другими характеристиками, имеют индивидуальные координаты и могут перемещаться из ячейки в ячейку в соответствии со своими скоростями, определяя функцию распределения по скоростям и координатам. Функция плотности восстанавливается с помощью интерполяции массы каждой частицы в узлы введенной сетки по известным координатам частицы с ядром PIC. Для нахождения сил, действующих на каждую частицу, используется интерполяция значения сеточной вектор-функции силы в местоположение частицы, а значения компонент сил, в свою очередь, вычисляются из значений сеточной функции потенциала. Сеточная же функция потенциала определяется из сеточной функции плотности, используя уравнение Пуассона.

Уравнение Пуассона в прямоугольной сеточной области с регулярной сеткой узлов аппроксимируется схемой второго порядка. Полученная система уравнений решается троекратным применением преобразования Фурье, которое реализуется на основе процедуры быстрого преобразования Фурье. Для этого необходимо независимо найти значение потенциала на границе области.

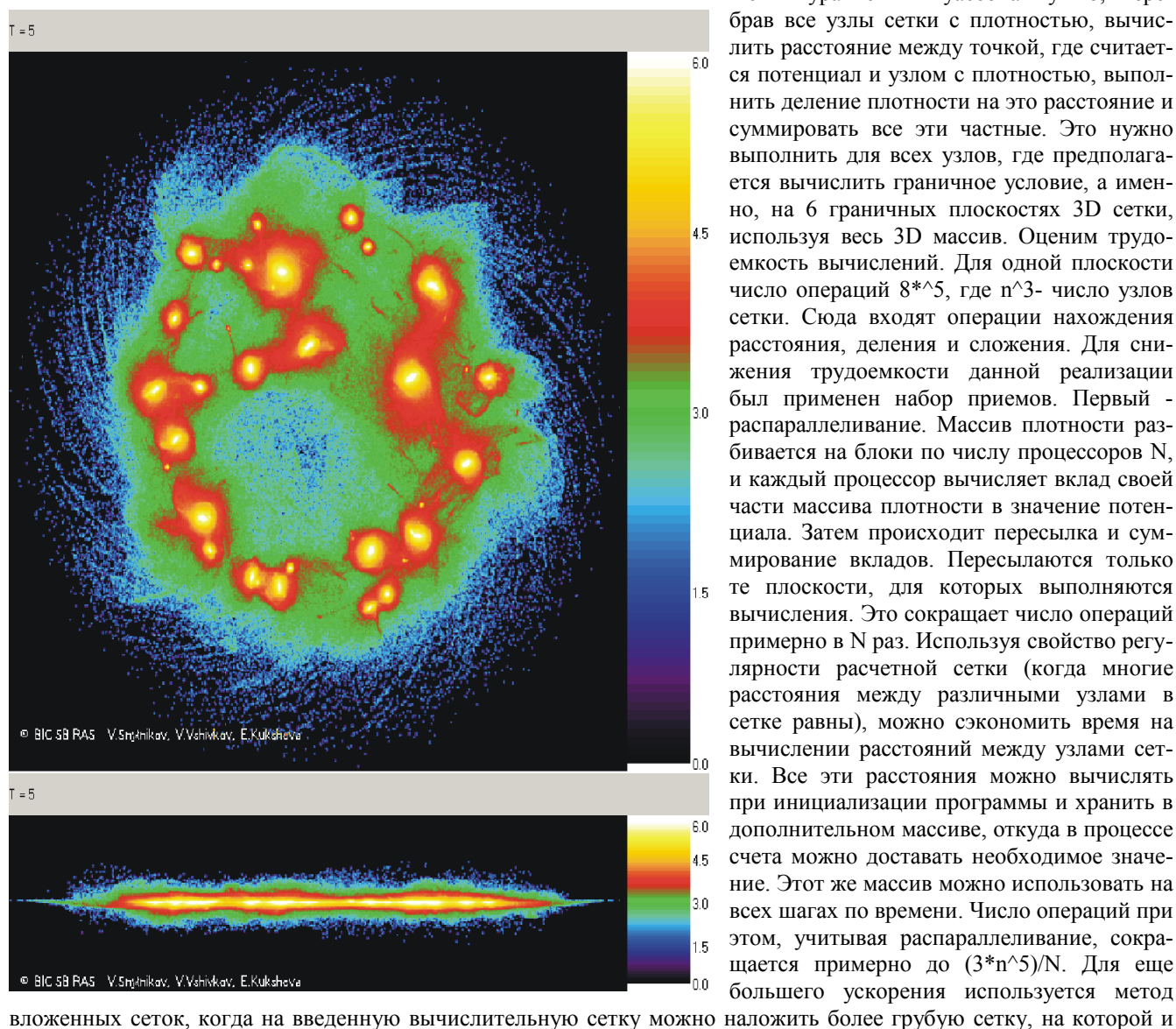
Граничные условия для уравнения Пуассона. В соответствии с граничным условием для изолированной системы, состоящем в убывании потенциала от точечной массы до нуля на бесконечности, необходимо вычислять значение потенциала на границе. В работе это делается с помощью дискретного аналога основного решения уравнения Пуассона.

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Уравнение Власова. Копии сеточных значений функций потенциала, плотности и трех компонент сил находятся во всех процессорах. Это упрощает распараллеливание, так как позволяет распределять массивы с частицами произвольным образом между процессорами. Недостатком алгоритма является то, что максимально доступный размер расчетных сеток ограничивается объемом оперативной памяти процессорного элемента, например до $256 \times 256 \times 256$, если процессорный элемент имеет 2Гб оперативной памяти. При инициализации каждый процессор распределяет в вычислительной области свою часть частиц и вычисляет их начальные скорости. На следующем шаге по времени происходит пересчет положения частиц и их скоростей без обменов массивами частиц между процессорами. Чтобы вычислить плотность, необходимо использовать все частицы, поэтому каждый процессор находит вклад в плотность своих частиц, затем происходит обмен вкладами и их суммирование.

Решение уравнения Пуассона. Уравнение Пуассона реализовано с помощью библиотеки FFTW, которая позволяет параллельно выполнять многомерные преобразования Фурье для комплексных чисел на многопроцессорных машинах с распределенной памятью и MPI [2]. Средствами FFTW выполняется следующее: массив значений потенциала делится по одному из направлений на блоки в соответствии с числом процессоров, каждый процессор выполняет преобразование Фурье для своего блока данных. Затем происходит обмен блоками между процессорами с целью образовать результат во всех процессорах. В итоге, все процессоры имеют массив потенциала с одинаковыми значениями.

Граничные условия. Чтобы вычислить потенциал с помощью дискретного аналога фундаментального решения уравнения Пуассона нужно, пере-



вычислять потенциал. При этом для вычисления вкладов соседних масс использовать мелкую сетку, а для дальних масс - грубую, а при вычислении значений на более подробной сетке использовать линейную интерполяцию. В этом случае вместо одного большого массива расстояний размером n^3 хранится два намного меньших массива k^3 и $(n/k)^3$, где k^3 - размерность маленького массива расстояний до ближних масс, а $(n/k)^3$ - размерность массива расстояний для дальних масс. Получающееся в результате всех модификаций число операций, можно примерно оценить как: $(9*n^5)/(N*k^2)+(2*n^2)/(k^2)$. Значение k должно находиться в разумном интервале, с учетом сохранения точности вычислений. В реализованной программе k примерно равен корню квадратному от n , а введенные массивы вместе обычно получаются примерно в 2000 раз меньше основных 3D массивов.

Параллельная реализация задачи (ее для краткости будем называть программа 3D3V) использует 7 трехмерных массива для хранения сеточных значений функций и 6 одномерных массивов для хранения координат и скоростей порядка 10^6 - 10^9 частиц. Параллельный алгоритм состоит из следующих основных блоков, каждый из которых выполняется на параллельных процессорах:

1. Инициализация, задание начального распределения частиц и скоростей, вычисление начальной плотности
 2. Вычисление граничных условий для уравнения Пуассона
 3. Решение уравнения Пуассона
 4. Решение уравнения Власова
 5. Вычисление плотности
 6. Сохранение промежуточных результатов
- Начиная со второго, блоки выполняются последовательно в цикле по времени.

ЭКСПЛУАТАЦИЯ ПРОГРАММЫ

Расчеты проводились удаленно в МСЦ на суперкомпьютерах МВС-6000, МВС-15000 из Новосибирска. Задачи запускались обычно на числе процессоров до 100. За отведенный интервал времени программа делала до 4000 шагов по времени, с периодическим сохранением результатов на диске. Полученные результаты загружались в Новосибирск за характерное время 2-4 часа, для дальнейшей обработки, в частности, построения фильмов с помощью оригинальной программы Gala [3] и других программ визуализации.

ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

С помощью параллельной программы 3D3V были проведены серии расчетов для решения некоторых задач гравитационной физики. Одна из них - это модельная задача распада гравитирующей среды на сгустки. Этот расчет можно также интерпретировать как формирование протозвезд из молекулярного облака. В начальный момент времени частицы распределены в виде плоского диска. Затем, под действием самогравитации частицы начинают собираться в сгустки, которые в дальнейшем не разваливаются, а ведут себя как самостоятельные, достаточно независимые друг от друга объекты. Они разлетаются, при этом вращаясь вокруг своих центров вращения. На рисунке представлен логарифм поверхностной плотности в экваториальной и меридианальной плоскости диска. В данном расчете размерность вычислительной сетки $512 \times 512 \times 128$, число модельных частиц 10^7 . Расчет выполнен на 16 процессорах Intel Itanium2.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана параллельная программа 3D3V для решения трехмерных задач гравитационной физики без столкновений для изолированных систем в декартовой системе координат. Началась опытная эксплуатация этой программы на суперкомпьютерах.

ЛИТЕРАТУРА:

1. В.Н. Снытников Абиогенный допланетный синтез пребиотического вещества. // Вестник Российской Академии Наук, Том 77, №3, с. 218-226, 2007.
2. Официальный сайт FFTW <http://www.fftw.org/>
3. E.A. Kuksheva, V.E. Malyshkin, S.A. Nikitin, A.V. Snytnikov, V.N. Snytnikov, V.A. Vshivkov Supercomputer simulation of self-gravitating media // Future Generation Computer Systems 21 (2005) 749-757