

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГРАВИТАЦИОННОЙ ФИЗИКИ НА КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМАХ

Э.А. Кукшева, В.Н. Снытников

Численное моделирование на суперкомпьютерах стало одним из необходимых и широко используемых инструментов при решении задач бесстолкновительной гравитационной физики: исследование коллективной динамики тел в окрестностях звездных дисков и нестационарных процессов в галактиках, изучение галактических скоплений и крупномасштабной структуры Вселенной. Важную роль в моделировании гравитирующих систем играют методы частицы-сетка, получившие в литературе название PM (Particle-Mesh). Метод PM состоит в приписывании всем частицам определенного ядра, с помощью которого на введенной сетке рассчитывается вносимая каждой частицей плотность и другие усредняемые функции. Далее на сетке по функции плотности от координат находится распределение гравитационного потенциала. Используя последнюю функцию, находится сила, действующая на каждую частицу со стороны всех остальных тел. Чтобы найти положение всех частиц на каждом шаге по времени необходимо решить порядка $6 \cdot 10^9$ ОДУ. При выполнении определенных условий на число частиц, сетку и представление физических параметров в вычислительных экспериментах PM-метод позволяет проводить математическое моделирование из физически первых принципов, связанных с кинетическим уравнением Власова-Лиувилля и уравнением Пуассона.

При изучении динамики развития неустойчивости методом PM в различных гравитационных системах необходимо использовать вычислительную сетку размером порядка 1000^3 узлов в трехмерных по пространственным переменным расчетах. Для обеспечения уровня флуктуаций плотности в 1-10% в ячейке должно быть до $10^3 - 10^4$ частиц. Тогда общее количество частиц для указанной сетки оценивается в 10^{12} .

В работах [1,2] были описаны параллельные программы для решения нестационарных трехмерных задач в цилиндрических и декартовых координатах. Для указанных программ имелось естественное ограничение на рабочие сетки – не более 256^3 узлов как следствие выбранного метода распараллеливания. Такой метод сразу упрощает распараллеливание и уменьшает число пересылок. Однако сетки более $256^3 - 512^3$ узлов не помещаются в ОЗУ процессора на кластерных системах. Поэтому главная цель данной работы – предложить и реализовать другой алгоритм распараллеливания, позволяющий работать с сетками более 256^3 узлов, а именно – метод декомпозиции области для вычислительных систем с распределенной памятью.

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 трехкратным применением преобразования Фурье, которое реализуется на основе процедуры быстрого преобразования Фурье. Для этого необходимо независимо найти значение потенциала на границе области.

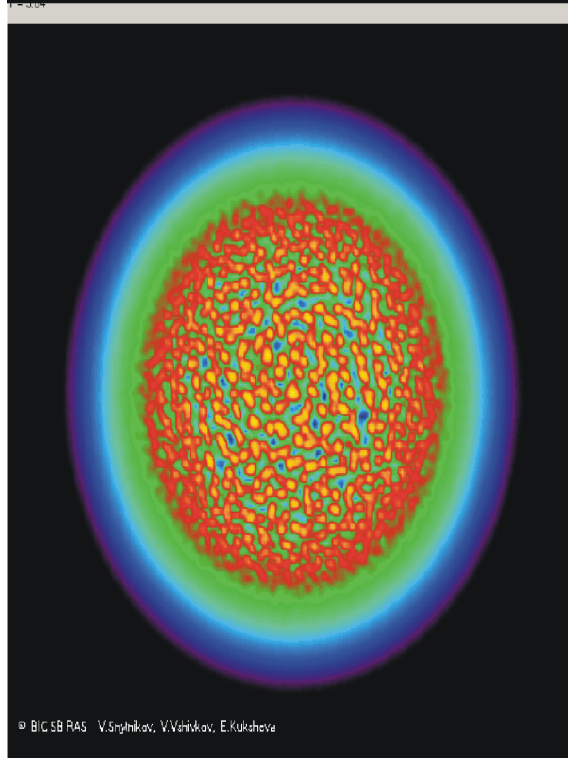
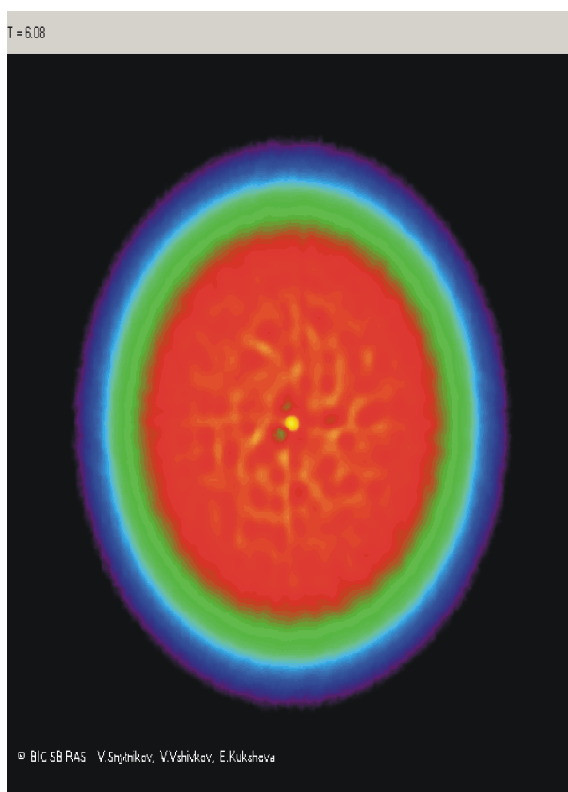
В соответствии с граничным условием для изолированной системы, состоящем в убывании потенциала от точечной массы до нуля на бесконечности, необходимо вычислять значение потенциала на границе. В работе это делается с помощью дискретного аналога основного решения уравнения Пуассона.

Для реализации приведенных численных методов необходимо хранить как минимум 2 трехмерных массива для сеточных значений потенциала [F] и плотности [M], и 6 одномерных массивов для координат и скоростей частиц. Расчетная область делится на слои вдоль оси абсцисс, число которых соответствует числу процессоров. Согласно этому делению в каждый процессор попадает часть массива [M] и [F]. Деление происходит с перекрытием областей, находящихся в соседних процессорах. Для массива [M] это перекрытие составляет один слой массива, а для массива [F] – два слоя. Параллельный алгоритм состоит из следующих блоков:

1. Начальное распределение частиц и их скоростей, вычисление начальной плотности;
2. Если не последний шаг по времени, то переход на пункт 3, иначе – выход;
3. Вычисление граничных условий для уравнения Пуассона;
4. Решение уравнения Пуассона методом Фурье;
5. Вычисление новых координат частиц;
6. Вычисление плотности по новым координатам частиц;

7. Сохранение промежуточных результатов и переход на пункт 2.

Решение уравнения Власова на каждом шаге приводит к вычислению новых координат частиц находящихся в каждом процессоре. Все частицы, вылетевшие за пределы процессора, помещаются во временные массивы: один для частиц, летящих налево, другой для частиц, летящих направо. В цикле по частицам формируется 2 массива с вылетающими частицами. После завершения цикла по частицам все процессоры начинают обмен с соседями справа и слева массивами с выбывшими частицами, при этом получая от них прибывшие частицы. Поскольку не известно, сколько частиц прибудет и убудет в каждом процессоре на каждом шаге, возникает проблема организации данных для постоянно меняющихся частиц. Поэтому, частицы хранятся в 6 массивах двойной точности: три массива для хранения координат и три - для хранения компонент скоростей частиц. При инициализации размер массивов частиц в каждом процессоре выбирается с запасом, реальное число частиц в этих массивах обычно меньше. Этот размер зависит от числа частиц. При вылете



частицы из процессора она переносится во временный массив, а на ее место записывается последняя частица из массива частиц. После окончания цикла по частицам после пересылок все вновь прибывшие частицы записываются в конец массива. При этом размерность всего массива частиц не меняется, а меняется только число ячеек, фактически участвующих в выполнении алгоритма.

Так как за один шаг по времени частица не может пересечь более одной ячейки массива потенциала [F], межпроцессорные коммуникации, связанные с миграцией частиц в типичных наших задачах обычно не велики. Путем проведения расчетов было установлено, что общее число частиц во всех процессорах, участвующих в межпроцессорных коммуникациях, в среднем составляет примерно 0.001% от общего количества частиц. Хотя, значение этого числа сильно зависит от задачи. Также на число обменов влияет количество процессоров: чем больше процессоров, тем больше «швов» и обменов, с падением эффективности распараллеливания.

После определения новых координат частиц необходимо вычислять сеточные значения плотности. Каждый процессор вычисляет свой слой массива плотности [M]. Однако в конце этого этапа приходится обмениваться двумерными массивами вкладов в плотность от соседних процессоров для граничных слоев. Полученная плотность используется для решения уравнения Пуассона.

Каждый процессор имеет в своей памяти только свой слой исходного массива плотности [M] для нахождения потенциала и только свой слой массива потенциала [F]. Поэтому внутри процедуры решения уравнения Пуассона все процессоры многократно обмениваются частями массива [F] со всеми процессорами. Эта часть алгоритма наиболее насыщена неизбежными межпроцессорными коммуникациями. Для обращения к функциям БПФ в этой части алгоритма использовалась библиотека MKL через ее «обертку» для процедур свободно распространяемой библиотеки FFTW.

Для решения уравнения Пуассона методом Фурье необходимо определить значение потенциала на 6-ти граничных плоскостях, распределенных по всем процессорам 3D сетки. Для этого необходима также вся распределенная 3D сетка. Нами было решено, что каждый процессор хранит граничные условия отдельно в шести двумерных массивах. Каждый процессор находит вклад своей области пространства в общий потенциал на границе. После чего происходит

пересылка массивов граничных условий и суммирование вкладов посредством коллективной редуцированной операции MPI. Для уменьшения числа операций вычисление потенциала происходит не в каждом узле массивов граничных условий, а с определенным интервалом на более грубой сетке. Значения же остальных ячеек определяется линейной интерполяцией.

Для программы проведена оценка эффективности распараллеливания. Соответствующие измерения проводились на кластере МВС-100К в МСЦ (Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН). Было обнаружено, что программа имеет низкую эффективность из-за не эффективности процедуры решения уравнения Пуассона, благодаря обилию в ней межпроцессорных коммуникаций. Был сделан вывод, что решать поставленную физическую задачу нужно на минимальном числе процессоров, в которое помещается данная задача.

На рисунке приведены результаты моделирования динамики формирования сгустков в плоском диске из тел в их самосогласованном гравитационном поле при развитии неустойчивости Джинса. Исследовалось поведение численного решения при сгущении вычислительной сетки и увеличении числа частиц. На рисунке сверху представлен расчет, выполненный на сетке с 128^3 узлов и 10^8 модельных частиц, на рисунке снизу представлен расчет, выполненный на сетке с $1024 \times 1024 \times 256$ и число частиц - 10^9 . Этот расчет выполнен в Сибирском суперкомпьютерном центре на кластере НКС-30Т с помощью данной программы. Из приведенных рисунков следует, что на сетке 128^3 и средним числом модельных частиц в ячейке порядка 10^3 обнаруживается только тенденция к формированию сгустков. И только уменьшение сетки до $1024 \times 1024 \times 256$ узлов и увеличение общего числа частиц в 10 раз позволило надежно рассчитать структуру сгустков, возникающую при развитии неустойчивости Джинса на ее нелинейных стадиях.

Заключение.

Разработана параллельная программа для решения трехмерных задач гравитационной физики без столкновений на сетках масштаба 1000^3 для существующих кластерных систем. Распараллеливание основано на декомпозиции пространственной области. Как показали расчеты на доступных нам кластерах, программа позволяет проводить необходимые вычислительные эксперименты на вычислительных системах с распределенной памятью. В результате работы стало также очевидно, что алгоритмы с распараллеливаемостью, как у решения уравнения Пуассона, сталкиваются с большими трудностями при своей эксплуатации на кластерных системах из-за большого числа межпроцессорных коммуникаций. В силу того, что уравнение Пуассона встречается в самых разных приложениях, остается актуальной задача создания эффективного параллельного алгоритма для его решения.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Вшивков В.А., Снытников В.Н., Снытников Н.В. Моделирование трехмерной динамики вещества в гравитационном поле на многопроцессорных ЭВМ. // Вычислительные технологии. 2006. Т.11, №2. 15-27.
2. Кукшева Э.А., Снытников В.Н. Параллельный алгоритм и программа Key7D для решения нестационарных трехмерных задач гравитационной физики. // Вычислительные технологии. 2007. Т.12, №1. 35-44.