МАСШТАБИРУЕМЫЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ВЛАСОВА-ПУАССОНА

В.А. Вшивков, Н.В. Снытников

Аннотация.

Разработан параллельный алгоритм для численного решения нестационарных задач, которые требуют решать систему уравнений Власова-Пуассона. Такие задачи возникают при моделировании некоторых явлений астрофизики и физики плазмы. Численный алгоритм основан на методе частиц в ячейках для решения уравнения Власова и конечно-разностном методе решения уравнения Пуассона. Параллельный алгоритм основан на декомпозиции расчетной области, предвычислении функции Грина на границах подобластей и параллельной реализации метода Джеймса для постановки задачи Дирихле на границе конечной расчетной области. Реализованный программный код позволяет проводить расчеты на сетках с 10 миллиардами узлов расчетной сетки и 100 млрд. частиц при использовании 10 тысяч процессоров.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 11-01-00307, интеграционного проекта СО РАН N.26.

I. Введение.

Для моделирования некоторых астрофизических задач, таких как исследование динамики галактик или околозвездных дисков, и задач физики плазмы необходимо решать систему уравнений, состоящую из бесстолкновительного уравнения Власова и уравнения Пуассона, на подробной сетке и на больших временных масштабах [1]. Фактически, для проведения серийных численных экспериментов один временной шаг на сетке 1000^3 с 10 млрд. частиц должен выполняться за абсолютное время порядка 1-10 секунд при выборе соответствующего числа процессоров. С точки зрения создания параллельного алгоритма задача усложняется тем, что подходы к декомпозиции области для конечно-разностного метода и метода частиц в ячейках должны быть согласованы таким образом, чтобы обеспечить как можно меньшее число межпроцессорных коммуникаций.

Существует несколько подходов к созданию параллельных алгоритмов:

1. Адаптивное измельчение сетки, которое обычно используется для задач моделирования иерархической структуры Вселенной или зарождения звезд из межзвездного вещества [2, 3]. К сожалению, этот метод не подходит для тех случаев, когда высокое пространственное разрешение необходимо для всей расчетной области.
2. Декомпозиция области, основанная на представлении гравитационного потенциала в виде суммы близкодействующей и дальнодействующей частей [4, 5]. При этом дальнодействующая часть вычисляется на грубой сетке, что оправдано, поскольку функция гравитационного потенциала от группы частиц является гладкой функцией на достаточном удалении от источников, а близкодействующая часть вычисляется на подробной сетке. К сожалению, без некоторых дополнительных предположений о свойствах функции плотности, эффективность алгоритма падает при использовании более чем несколько тысяч процессоров.
3. Параллельные алгоритмы решения СЛАУ, получаемых после аппроксимации уравнения Пуассона [6,7]. Эти методы допускают декомпозицию области лишь по одному направлению, что накладывает ограничения на использование большого числа процессоров в трехмерном случае. В данной работе нами был создан новый метод декомпозиции области для решения нестационарных задач, включающих в себя уравнение Пуассона и уравнения Власова. Метод основан на частичном предвычислении функции Грина для заданных сеточной функции потенциала и соответствующих краевых условий и методе сопряжения подобластей, используемом в [8, 3].

II. Последовательный численный алгоритм

Для решения системы уравнений Власова-Пуассона используется декартова система координат, где в исходный момент времени задается начальная функция распределения вещества. Метод Джеймса [8] используется для постановки краевых условий для уравнения Пуассона (вычисления потенциала на границе конечной расчетной области). Далее на каждом временном шаге уравнение Власова решается методом частиц в ячейках, а уравнение Пуассона — конечно-разностным методом на 7-точечном шаблоне. Полученная после аппроксимации СЛАУ решается методом БПФ, примененным к двум координатам и методом прогонки по третьей координате.

III. Параллельная реализация

А. Общая схема алгоритма

1. Исходная подобласть разбивается на подобласти по двум направлениям. Каждая подобласть хранит значения координат и скоростей частиц, которые находятся в данный момент в этой подобласти.
2. По координатам частиц в каждой подобласти восставливается сеточная функция плотности.
3. Для каждой подобласти вычисляется потенциал с помощью параллельного решения уравнения Пуассона для всей подобласти.
4. Вычисляются сеточные функции сил и новые скорости и координаты частиц. Для тех частиц, которые "перешли" из одной подобласти в другую, выполняются межпроцессорные коммуникации. Таких частиц на каждом временном шаге много меньше общего количества частиц в данной подобласти, и, следовательно, коммуникации оказываются менее трудоемкой процедурой чем процедура вычисления новых координат. Переход на шаг 2.

B. Схема параллельного решения однородной задачи Дирихле для уравнения Пуассона с декомпозицией по одному направлению

1. Исходная область разбивается на P подобластей, каждая из которых имеет общую границу с двумя соседними подобластями.
2. В каждой подобласти решается уравнение Пуассона с нулевыми граничными условиями.
3. С помощью метода сопряжения подобластей [3] вычисляются "экранирующие заряды", локализованные на границе подобласти.
4. С помощью предвычисленной функции Грина для однородной задачи Дирихле для уравнения Пуассона вычисляется потенциал, создаваемый экранирующими зарядами на границах всех подобластей.
5. Выполняются межпроцессорные коммуникации для вычисления потенциала, создаваемого всеми экранирующими зарядами.
6. Решается уравнение Пуассона с граничными условиями, вычисленными на шаге 5.

Ключевым моментом этого алгоритма является тот факт, что функция Грина определена для заданной сетки и краевых значение, и, таким образом, ее можно предвычислить в начальный момент времени и эффективно использовать при решении нестационарных задач.

Декомпозиция по двум направлениям осуществляется за счет двукратного применения описанного алгоритма и соответствующей реорганизации массивов данных.

IV. Заключение

Разработанный параллельный алгоритм решения системы уравнений Власова-Пуассона позвол проводить численные эксперименты на подробных сетках (2000^3) с большим количеством частиц (до 100 млрд.), способных с хорошей точностью восстановить функцию распределения.

ЛИТЕРАТУРА:

1. В.Н. Снытников, Э.А. Кукшева, Т.В. Маркелова, Н.В. Снытников, О.А. Стадниченко, О.П. Стояновская. Суперкомпьютеры и проблемы химической эволюции при формировании планет // Тезисы Международной суперкомпьютерной конференции "Научный сервис в сети Интернет-2010".
2. Greengard L., Lee J.-Y. A Direct Adaptive Poisson Solver of Arbitrary Order Accuracy //J. Comput. Phys. 1996. Vol.125. P.415-424.
3. Huang J., Greengard L. A Fast Direct Solver for Elliptic Partial Differential Equations On Adaptively Refined Meshes // SIAM J. Sci. Comput. 2000. Vol.21. P.1551-1566.
4. Balls G.T., Colella P. A Finite Difference Domain Decomposition Method Using Local Corrections for the Solution of Poisson's Equation // J. Comp. Physics. 2002. Vol.180. P.25-53.
5. Н.В. Снытников. Исследование квазистационарных решений системы уравнений звездной динамики на суперЭВМ // Тезисы Международной суперкомпьютерной конференции "Научный сервис в сети Интернет-2010".
6. Terekhov A.V. Parallel Dichotomy Algorithm for Solving Tridiagonal System of Linear Equations with Multiple Right-Hand Sides //Parallel Computing. 2010. Vol.36. P.423-438.
7. Яненко Н.Н., Коновалов А.Н., Бугров А.Н., Шустов Г.В. Об организации параллельных вычислений и "распараллеливании" прогонки //Численные методы механики сплошной среды. 1978. Т.9. С.139-146.
8. James R.A. The Solution of Poisson's Equation for Isolated Source Distributions // J. Comp. Physics. 25, pp.71--93 (1977).