

Параллельный метод решения уравнения Пуассона в цилиндрических координатах для задач астрофизики*

Н.В. СНЫТНИКОВ

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

e-mail: nik@ssd.sscs.ru

Разработан параллельный конечно-разностный метод для решения уравнения Пуассона в цилиндрических координатах и предназначенный для задач, требующих подробных сеток с числом узлов порядка 10 миллиардов и, соответственно, суперкомпьютеров с 10^3 – 10^4 процессоров. Созданный алгоритм использует декомпозицию области с помощью метода локальных коррекций, метод Джеймса для вычисления потенциала изолированных систем и компактную разностную схему четвертого порядка аппроксимации.

1. Введение

В настоящее время, в связи с ожидаемой доступностью суперкомпьютеров с сотнями тысяч процессоров, появляется необходимость в разработке параллельных алгоритмов, позволяющих проводить серийные численные эксперименты на сетках с количеством узлов от $10^3 \times 10^3 \times 10^3$ до $10^4 \times 10^4 \times 10^4$ и применимых к решению задач астрофизики (звездной динамики и гравитационной газодинамики).

Существуют два основных подхода для обеспечения высокого пространственного разрешения: адаптивное измельчение сетки [1], [2] и декомпозиция области [3]. Кроме того, недавно был представлен параллельный алгоритм прогонки для решения набора трехдиагональных систем с одинаковой правой частью [4], сконструированный в духе метода [5]. Его основная идея заключается в начальном предвычислении определенных строк обратной матрицы и использовании этой информации для быстрого вычисления векторов решения для каждой новой правой части. Таким образом, если решение уравнения Пуассона сведено с помощью быстрого преобразования Фурье к решению независимых трехдиагональных систем, то далее каждую из этих систем можно решить с помощью метода [4].

В настоящей работе мы адаптировали метод декомпозиции области на основе метода локальных коррекций (МЛК) [3, 6] для его применения в цилиндрических координатах. Для этого были решены две подзадачи: метод Джеймса [7], позволяющий вычислять потенциал изолированных систем, был модифицирован для цилиндрических координатах с «вырезанной» центральной областью; и был разработан компактный разностный шаблон четвертого порядка аппроксимации с граничными условиями на центральной оси цилиндра, заданными таким образом, что итоговая система решается прямыми методами быстрого преобразования Фурье и трехдиагональной прогонкой по радиусу.

*Работа выполнена при частичной поддержке Междисциплинарным интеграционным проектом N.26, Междисциплинарным интеграционным проектом N.113.

Статья организована следующим образом: в разделе 2 дается общее описание алгоритма, в разделе 3 схематично описан компактный разностный шаблон четвертого порядка, в разделе 4 представлены результаты измерения производительности параллельной реализации.

2. Общее описание алгоритма

Мы следуем описанию алгоритма, предложенному в [3] для двумерного уравнения Пуассона в декартовых координатах и позднее расширенному на трехмерный декартовый случай в [6]. Его основная идея заключается в представлении потенциала $\Phi(\mathbf{r})$ в виде локальной близкодействующей части $\Phi^{loc}(\mathbf{r})$ и дальнедействующей части $\Phi^{far}(\mathbf{r})$, где $\Phi^{loc}(\mathbf{r})$ требует подробной сетки, а $\Phi^{far}(\mathbf{r})$ хорошо представима на грубой сетке, поскольку предполагается, что дальнедействующий потенциал является достаточно гладкой функцией.

В цилиндрических координатах алгоритм выглядит следующим образом.

1. Исходная область Ω подразделяется на P непересекающихся подобластей Ω_p по радиальной и вертикальной координатам. Каждой подобласти присваивается один процессор.
2. Для каждой подобласти Ω_p ($p = 1, \dots, P$) вводится подробная сетка $N_r \times N_\phi \times N_z$ таким образом, что объединение этих сеток является требуемой подробной сеткой для всей области Ω . Пространственные шаги сетки обозначаются h_r, h_ϕ, h_z . Если P записывается как $P_r \times P_z$, где P_r и P_z обозначают число подобластей по радиальной и вертикальной координатам, то глобальная подробная сетка в Ω имеет размер: $(P_r \cdot N_r) \times N_\phi \times (P_z \cdot N_z)$.
3. Для каждой подобласти Ω_p (параллельно) решается локальное уравнение Пуассона для изолированных систем с краевыми условиями, заданными на бесконечности:

$$\Delta \Phi_p(\mathbf{r}) = 4\pi G \rho_p(\mathbf{r}), \quad \Phi_p(\mathbf{r})|_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} = 0,$$

где Φ_p это потенциал, создаваемый распределением зарядов с плотностью ρ_p внутри Ω_p , а G – гравитационная постоянная.

На этом шаге используется разностный оператор Лапласа с компактным шаблоном и метод Джеймса для обработки краевых условий, заданных на бесконечности. В итоге получаем сеточную функцию $\Phi_p^{h,\infty}$, где h обозначает подробную сетку, а ∞ обозначает тот факт, что функция является решением задачи с краевыми условиями, заданными на бесконечности.

4. В области Ω вводится грубая сетка $M_r \times M_\phi \times M_z$ для глобального решения. Размеры сетки M_r, M_ϕ, M_z выбираются таким образом что:

$$M_d = \frac{P_d \cdot N_d}{CoarseFactor}, \quad d = r, \phi, z,$$

где $CoarseFactor = 4 \div 32$ и является настраиваемым параметром численного эксперимента. Пространственные шаги грубой сетки обозначим H_r, H_ϕ, H_z . Тогда выполняется следующее соотношение:

$$H_d = CoarseFactor \cdot h_d, \quad d = r, \phi, z.$$

5. Для каждой подобласти вычисляем плотность ρ_p^H на грубой сетке с помощью применения разностного оператора Лапласа четвертого порядка к сеточной функции $\Phi_p^{h|H,\infty}$, где $h|H$ обозначает, что значения функции $\Phi_p^{h,\infty}$ берутся на грубой сетке H .
6. Имея функцию плотности ρ_p^H , определенную в каждой подобласти на грубой сетке, конструируем глобальную сеточную функцию ρ^H с помощью объединений ρ_p^H (глобальных пересылок между подобластями Ω_p).
7. Решаем уравнение Пуассона для изолированных систем с краевыми условиями, заданными на бесконечности, с использованием разностного оператора Лапласа четвертого порядка аппроксимации:

$$\Delta\Phi(\mathbf{r}) = 4\pi G\rho(\mathbf{r}), \quad \Phi(\mathbf{r})|_{|\mathbf{r}|\rightarrow\infty} = 0. \quad (1)$$

8. Вычисляем граничные условия $\Phi_p(\Gamma(\Omega))$ для заключительного шага. Сначала из глобального потенциала Φ_p^H вычитаем локальную часть $\Phi_p^{h|H,\infty}$. Затем интерполируем значения полученного глобального потенциала Φ_p^H в граничные узлы подробной сетки Ω_p (при этом используется интерполяционная схема четвертого порядка). Наконец, к полученным граничным значениям прибавляем соответствующие значения $\Phi_p^{h,\infty}$.
9. Для каждой подобласти решаем задачу Дирихле для уравнения Пуассона:

$$\Delta\Phi_p(\mathbf{r}) = 4\pi G\rho_p(\mathbf{r}), \quad \Phi_p(\mathbf{r})|_{\Gamma(\Omega_p)} = \Phi_p(\Gamma(\Omega)).$$

Таким образом нераспараллеливаемые вычисления осуществляются только на шаге 7 для сетки размером $M_r \times M_\phi \times M_z$, а межпроцессорные коммуникации (сбор глобального трехмерного массива той же размерности) выполняются на шаге 6. Поскольку предполагается, что количество узлов глобальной грубой сетки значительно меньше количества узлов подробной сетки (параметр $CoarseFactor = 4 \div 32$), то эти шаги не становятся определяющими частями программы. Итоговый порядок аппроксимации схемы составляет $O(H^4 + h^2)$. Выбирая подходящее соотношение между шагами H и h (это соотношение накладывает еще одно ограничение на параметр $CoarseFactor$) мы получим второй порядок аппроксимации $O(h^2)$.¹

В следующем разделе приводится схематичное описание схемы четвертого порядка аппроксимации. Детальное описание разработанной модификации метода Джеймса для цилиндрических координат и используемых методов решения СЛАУ, полученной после аппроксимации, приводятся в работе [8].

3. Компактный шаблон четвертого порядка

Компактный шаблон четвертого порядка аппроксимации для решения (1) получен стандартным способом с использованием выражений, содержащих первые и вторые частные производные правой части ρ (в предположении, что они существуют).

¹Для цилиндрических координат порядок аппроксимации выбранного семиточечного шаблона составляет $O(\frac{(h_r^2 + h_\phi^2)}{r} + h_z^2)$.

Подробное описание этого подхода может быть найдено в работе [11] для уравнения Гельмгольца в двумерных полярных координатах.

Возьмем известный 7-точечный шаблон со смещением на $1/2$ шага по радиусу [9, 10]:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_r^2 r_i} \left[r_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{i+1,k,l} - \Phi_{i,k,l}) - r_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{i,k,l} - \Phi_{i-1,k,l}) \right] + \\ & \frac{1}{h_\phi^2 r_i^2} (\Phi_{i,k+1,l} - 2\Phi_{i,k,l} + \Phi_{i,k-1,l}) + \\ & \frac{1}{h_z^2} (\Phi_{i,k,l+1} - 2\Phi_{i,k,l} + \Phi_{i,k,l-1}) = \\ & \qquad \qquad \qquad = \rho_{i,k,l} \\ & i = \frac{1}{2}, \dots, N_r - \frac{1}{2}; \quad k = 1, \dots, N_\phi; \quad l = 1, \dots, N_z. \end{aligned} \quad (2)$$

Введем обозначения $\Lambda_r^2, \Lambda_\phi^2, \Lambda_z^2$:

$$\begin{aligned} \Lambda_r^2 &= \frac{1}{h_r^2 r_i} \left[r_{i+\frac{1}{2}} (\Phi_{i+1,k,l} - \Phi_{i,k,l}) - r_{i-\frac{1}{2}} (\Phi_{i,k,l} - \Phi_{i-1,k,l}) \right], \\ \Lambda_\phi^2 &= \frac{1}{h_\phi^2 r_i^2} (\Phi_{i,k+1,l} - 2\Phi_{i,k,l} + \Phi_{i,k-1,l}), \\ \Lambda_z^2 &= \frac{1}{h_z^2} (\Phi_{i,k,l+1} - 2\Phi_{i,k,l} + \Phi_{i,k,l-1}). \\ \Lambda_r^2 + \Lambda_\phi^2 + \Lambda_z^2 &= \rho_{i,k,l}. \end{aligned} \quad (3)$$

Также обозначим F_r, F_ϕ, F_z :

$$\begin{aligned} \Lambda_r^2 &= F_r = \rho_{i,k,l} - \Lambda_\phi^2 - \Lambda_z^2, \\ \Lambda_\phi^2 &= F_\phi = \rho_{i,k,l} - \Lambda_r^2 - \Lambda_z^2, \\ \Lambda_z^2 &= F_z = \rho_{i,k,l} - \Lambda_r^2 - \Lambda_\phi^2. \end{aligned} \quad (4)$$

Используя разложение Тейлора для $\Phi_{i\pm 1,k,l}$ в окрестности $\Phi_{i,k,l}$ вплоть до членов порядка $O(h_r^8)$, подставляя выражение в Λ_r^2 , и учитывая тождество (полученное с помощью дифференцирования уравнения Пуассона по r):

$$\Phi^{(4)} + \frac{2\Phi^{(3)}}{r} = F_r'' + \frac{F_r'}{r} + \frac{F_r}{r^2} - \frac{2\Phi'}{r^3},$$

(где все F' обозначает частную производную по r), получим:

$$\Lambda_r^4 = \Lambda_r^2 - \frac{h_r^2}{12} (A(\rho) - A(\Lambda_\phi^2) - A(\Lambda_z^2)) + \frac{h_r}{12r^3} (\Phi_{i+1,k,l} - \Phi_{i-1,k,l}) \quad (5)$$

где $A(X)$ это конечно разностный оператор, определенный в виде:

$$A(X) = \frac{X_{i+1,k,l} - 2X_{i,k,l} + X_{i-1,k,l}}{h_r^2} + \frac{X_{i+1,k,l} - X_{i-1,k,l}}{2r_i h_r} + \frac{X_{i,k,l}}{r_i^2}.$$

Аналогичным образом получим для Λ_ϕ^2 и Λ_z^2 :

$$\begin{aligned} \Lambda_\phi^4 &= \Lambda_\phi^2 - \frac{h_\phi^2}{12} (B(\rho) - B(\Lambda_r^2) - B(\Lambda_z^2)), \\ B(X) &= \frac{X_{i,k+1,l} - 2X_{i,k,l} + X_{i,k-1,l}}{h_\phi^2}. \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_z^4 &= \Lambda_z^2 - \frac{h_z^2}{12} (C(\rho) - C(\Lambda_r^2) - C(\Lambda_\phi^2)), \\ C(X) &= \frac{X_{i,k,l+1} - 2X_{i,k,l} + X_{i,k,l-1}}{h_z^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Полученный оператор аппроксимирует уравнение Пуассона с порядком $O(\frac{(h_r^4+h_\phi^4)}{r} + h_z^4)$

$$\Lambda_r^4 + \Lambda_\phi^4 + \Lambda_z^4 = \rho_{i,k,l}. \quad (8)$$

Несмотря на громоздкость полученной схемы, она обладает той же структурой, что и исходный шаблон второго порядка. Однако существует сложность с заданием граничных условий на полюсе. Исходная схема второго порядка (2) формально требует, чтобы значения $\Phi_{i-1,k,l}$ были известны для $i = 1/2$. Однако из-за нулевого множителя $r_{i-\frac{1}{2}}$, весь член $r_{i-\frac{1}{2}}(\Phi_{i,k,l} - \Phi_{i-1,k,l})$ также обращается в ноль, и вычислять соответствующие значения не требуется.

К сожалению, это свойство не выполняется для созданной схемы четвертого порядка. В этом случае для постановки граничных условий можно использовать методы, описанные в [10, 12]. Однако мы воспользовались подходом, предложенным в [13]. Его суть заключается в записи узла $(-1/2, k, l)$ через $(1/2, k + N_\phi/2, l)$ и дальнейшем применении преобразования Фурье для каждой функции, фигурирующей в схеме. Оказывается, что тогда значение любой Фурье-гармоники с номером m в узле $(-1/2, l)$ может быть записано как $G_{-\frac{1}{2},l}(m) = (-1)^m G_{\frac{1}{2},l}(m)$. То есть все неизвестные граничные значения исчезают, и к СЛАУ может быть применено преобразование Фурье по вертикальной координате и прогонка по радиусу.

4. Оценка производительности

Тестовые расчеты для оценки производительности программы выполнялись на кластерных системах Сибирского суперкомпьютерного центра (ССКЦ) и Межведомственного суперкомпьютерного центра (МСКЦ). В Таблице 1 представлено время исполнения программы, полученное на кластере МСКЦ, основанном на процессорах Intel Xeon.

Данные тестовые расчеты показывают, что глобальные коммуникации не являются узким местом программы даже в случае использования больших сеток (аналогичные результаты были также получены для сетки $2048 \times 2048 \times 2048$). Таким образом созданный параллельный алгоритм продемонстрировал приемлемые результаты и возможность проведения серийных численных экспериментов на очень подробных сетках. Дальнейшие улучшения как самого алгоритма, так и его программной реализации, могут быть проведены с помощью оптимизации последовательных алгоритмов и оптимального выбора параметра *CoarseFactor* таким образом, чтобы максимально уменьшить размер глобальной грубой сетки при сохранении качества решения.

Список литературы

- [1] GREENGARD L., LEE J.-Y. A Direct Adaptive Poisson Solver of Arbitrary Order Accuracy // J. Comput. Phys. 1996. Vol.125. P.415–424.
- [2] 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.
- [3] 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.

Number of processors, Local grid	Время решения для сетки $1024 \times 1024 \times 1024$ с различными значениями <i>CoarseFactor</i> , секунды								
	<i>CoarseFactor</i> = 4 Глоб. сетка: 256^3			<i>CoarseFactor</i> = 8 Глоб. сетка: 128^3			<i>CoarseFactor</i> = 16 Глоб. сетка: 64^3		
	Общее время			Общее время			Общее время		
	Лок.	Сбор.	Глоб.	Лок.	Сбор.	Глоб.	Лок.	Сбор.	Глоб.
64	255.2			125.4			116.9		
$128 \times 1024 \times 128$	115.2	0.7	140	115.2	< 0.1	10.2	115.2	< 0.1	1.7
256	172.8			42.3			33.8		
$64 \times 1024 \times 64$	32	0.8	140	32	< 0.1	10.2	32	< 0.1	1.7
1024	154.1			23.4			14.9		
$32 \times 1024 \times 32$	13	1.1	140	13	0.2	10.2	13	0.2	1.7

Т а б л и ц а 1. Оценка производительности программы для сетки с числом узлов $1024 \times 1024 \times 1024$, различным количеством процессоров и значениями параметра *CoarseFactor*. *Лок. сетка* обозначает размер подробной сетки, покрывающей каждую подобласть. *Глоб. сетка* обозначает размер глобальной грубой сетки. *Лок.* – время выполнения всех локальных процедур. *Сбор.* – время, требуемое на глобальные коммуникации (сбор глобальной грубой сетки). *Глоб.* – время, требуемое для решения уравнения Пуассона на глобальной грубой сетке.

- [4] ТЕРЕКНОВ А.В. Parallel Dichotomy Algorithm for Solving Tridiagonal System of Linear Equations with Multiple Right-Hand Sides // Parallel Computing. 2010. Vol.36. P.423–438.
- [5] 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.
- [6] MCCORQUODALE P., COLELLA P., BALLS G.T., BADEN S.B. A Local Corrections Algorithm for Solving Poisson's Equation in Three Dimension // Comm. App. Math. And Comp. Sci. 2007. Vol.2. P.57–81.
- [7] JAMES R.A. The Solution of Poisson's Equation for Isolated Source Distributions // J. Comp. Physics. 1977. Vol.25. P.71–93.
- [8] СНЫТНИКОВ Н.В. Computation of Gravitational Potential of Isolated Systems in Cylindrical Coordinates // Bulletin of Novosibirsk Computing Centre. 2011. In press.
- [9] В.А. ВШИВКОВ, В.Н. СНЫТНИКОВ, Н.В. СНЫТНИКОВ. Моделирование трехмерной динамики вещества в гравитационном поле на многопроцессорных ЭВМ // Вычислительные технологии. 2006, Т.11. N.2. С.15–27.
- [10] САМАРСКИЙ А.А., АНДРЕЕВ В.Б. Разностные методы для эллиптических уравнений. М.: Наука. 1976.
- [11] BRITT S., TSYNKOV S., TURKEL E. A Compact Fourth Order Scheme for the Helmholtz Equation in Polar Coordinates // Journal of Scientific Computing. 2010. Vol.45. P.26–47.
- [12] ПААСОНЕН В.И. Граничные условия повышенной точности в полюсах координатных систем // Вычислительные технологии. 2000. Т.5, N.1. С.93–105.
- [13] MOHSENI K., COLONIUS T. Numerical Treatment of Polar Coordinate Singularities // J. Comp. Physics. 2000. Vol.157. P.787–795.