

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

А В Т О М Е Т Р И Я

2006, том 42, № 3

УДК 518.12

**ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ
РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА***

А. В. Снытников

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,

Новосибирск

E-mail: snytav@ssd.ssc.ru

Построен параллельный метод решения уравнения Пуассона в результате использования преобразования Фурье. Основной особенностью метода является увеличение ускорения параллельной программы за счет применения многосеточного метода к вычислению нулевой гармоники потенциала. Реализован многосеточный метод для цилиндрической геометрии.

Введение. В задаче моделирования динамики протопланетного диска область решения имеет вид кругового цилиндра [1], при этом диск считается бесконечно тонким и находится на нижней грани цилиндра. Уравнение Пуассона решается на каждом временном шаге процесса моделирования. Система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), которая получается при дискретизации уравнения Пуассона, является плохо обусловленной. Таким образом, возникает задача решения трехмерной плохо обусловленной СЛАУ большого размера, что требует разработки параллельных методов.

В работе [2] приведена таблица, показывающая, что итерационные методы – методы сопряженных градиентов или верхней релаксации – работают медленнее (сложность $O(N^{3/2})$, где N – число неизвестных), чем прямые – метод преобразования Фурье или блочная циклическая редукция (сложность $O(N \log N)$). Тем не менее итерационные методы обладают важным с точки зрения решаемой задачи достоинством: они работают намного быстрее при наличии близкого к решению начального приближения. В задаче моделирования протопланетного диска уравнение Пуассона решается на каждом временном шаге, поэтому целесообразно использовать итерационные методы,

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-01-00665), интеграционного проекта СО РАН (№ 148), Президиума РАН (программа «Происхождение и эволюция биосферы» № 25-2), российско-голландского проекта NWO-GRID (контракт NWO-RFBS 047.016.007), российско-голландского проекта NWO-Plasma (контракт NWO-RFBS 047.016.018), программы Рособразования «Развитие научного потенциала ВШ» (проект РНП.2.2.1.1.3653).

которые способны учитывать решение, полученное на предыдущем временном шаге.

Уравнение Пуассона в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = 4\pi G\rho. \quad (1)$$

В случае бесконечно тонкого диска правая часть уравнения Пуассона заменяется выражением $\delta(z)\sigma(r, \varphi)$, где $\delta(z)$ – дельта-функция Дирака; $\sigma(r, \varphi)$ – поверхностная плотность.

На поверхности диска существует разрыв нормальной производной потенциала

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z_{z \rightarrow +0}} - \frac{\partial \Phi}{\partial z_{z \rightarrow -0}} = 2\pi\gamma\sigma(r, \varphi). \quad (2)$$

В цилиндрической системе координат вводится равномерная сетка. В плоскости диска вторая производная потенциала по направлению z не существует. Тем не менее для узлов сетки, находящихся в плоскости диска, аналогичное уравнение может быть получено с учетом граничного условия (2). Дискретизация уравнения Пуассона дает систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_r^2} \left[\frac{r_i}{r_{i-1/2}} \Phi_{i+1/2, k-1/2, l} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} \Phi_{i-3/2, k-1/2, l} \right] + \\ & + \frac{1}{h_\varphi^2 r_{i-1/2}^2} [\Phi_{i-1/2, k+1/2, l} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + \Phi_{i-1/2, k-3/2, l}] + \\ & + \frac{1}{h_z^2} [u_l \Phi_{i-1/2, k-1/2, l+1} - 2\Phi_{i-1/2, k-1/2, l} + d_l \Phi_{i-1/2, k-1/2, l-1}] = \rho_{i-1/2, k-1/2, l}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$i=1, \dots, N_r, \quad k=1, \dots, N_\varphi, \quad l=1, \dots, N_z,$$

$$u_l = \begin{cases} 1, & 1 < l < N_z; \\ 2, & l=1, \end{cases} \quad d_l = \begin{cases} 1, & 1 < l < N_z; \\ 0, & l=1, \end{cases}$$

$$\rho_{i-1/2, k-1/2, l} = \begin{cases} 0, & 1 < l < N_z; \\ 2\pi\gamma\sigma_{i-1/2, k-1/2}, & l=1. \end{cases}$$

Здесь N_r, N_φ, N_z – число узлов по радиальной, угловой и z -координатам соответственно.

Целью предлагаемой работы является создание параллельного метода для увеличения ускорения параллельной программы при распараллеливании решения уравнения Пуассона.

Метод решения СЛАУ. Первый шаг в построении параллельного метода решения уравнения Пуассона – это преобразование Фурье по угловой координате:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_r^2 r_{i-1/2}} [r_i H_{i+1/2, l}(m) + r_{i-1} H_{i-3/2, l}(m)] + \\ & + \frac{1}{h_z^2} [d_l H_{i-1/2, l-1}(m) + u_l H_{i-1/2, l+1}(m)] - \\ & - 2 \left[\frac{1}{h_r^2} + \frac{1}{h_z^2} + \frac{1}{h_\phi^2 r_{i-1/2}^2} \sin^2 \frac{\pi m}{K_{\max}} \right] H_{i-1/2, k-1/2, l} = R_{i-1/2, l}, \quad (4) \\ & i=1, \dots, N_r, \quad m=0, \dots, N_\phi - 1, \quad l=1, \dots, N_z. \end{aligned}$$

Полученные системы линейных алгебраических уравнений для фурье-гармоник потенциала полностью независимы друг от друга, поэтому возникает естественная возможность распараллеливания метода путем декомпозиции области по угловым волновым числам m . При этом полностью исключаются коммуникации между процессорами на этапе решения СЛАУ.

Рассмотрим строку матрицы системы линейных уравнений для фурье-гармоники с волновым числом m :

$$\begin{aligned} A_{i, l}(m) = & \left\{ \dots, \frac{1}{h_z^2}, \dots, \frac{1}{h_r^2} \frac{r_{i-3/2}}{r_{i-1/2}}, -2 \left[\frac{1}{h_z^2} + \frac{1}{h_r^2} + \frac{2}{h_\phi^2 r_{i-1/2}^2} \sin^2 \frac{\pi m}{N_\phi} \right], \right. \\ & \left. \frac{1}{h_r^2} \frac{r_{i+1/2}}{r_{i-1/2}}, \dots, \frac{1}{h_z^2}, \dots \right\}, \quad i=1, \dots, N_r, \quad m=0, \dots, N_\phi - 1, \quad l=1, \dots, N_z. \end{aligned}$$

Таким образом, матрица системы является пятидиагональной. Видно, что для $m=0$ диагональный элемент матрицы A равен сумме недиагональных, т. е. диагональное преобладание очень слабо выражено. Далее с увеличением m диагональный элемент растет. Для коротковолновых гармоник (с большим m) имеется выраженное диагональное преобладание, в то время как для длинноволновых гармоник диагональное преобладание слабое. Это приводит к медленной сходимости при решении СЛАУ для нулевой гармоники итерационными методами или к потере точности, или даже численной неустойчивости при использовании прямых методов.

Система линейных алгебраических уравнений (4) решалась методом блочной последовательной верхней релаксации (БПВР). Для этого метода число итераций зависит от номера гармоники, как показано на рис. 1. Видно, что основной вклад в нагрузку вычислительной системы вносит именно нулевая гармоника. Важно отметить, что такое распределение нагрузки по гармоникам является особенностью СЛАУ (матрица СЛАУ является плохо обусловленной), а не используемых численных методов.

Основное утверждение предлагаемой работы состоит в следующем: ускорение параллельной программы значительно (в 4 раза) увеличивается в результате применения более быстрого метода решения СЛАУ к расчету нулевой гармоники потенциала. Данное утверждение иллюстрируется приме-

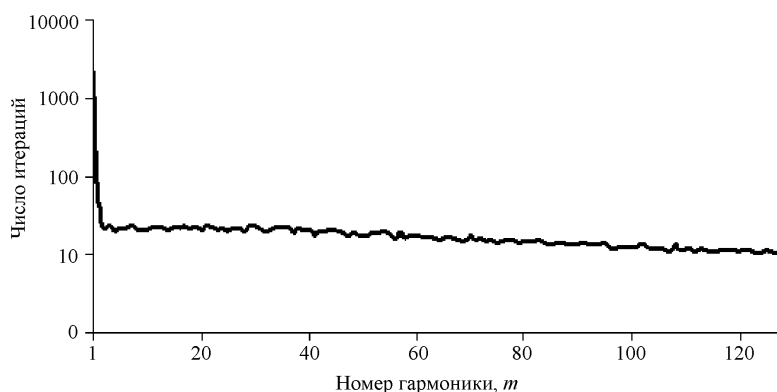


Рис. 1. Зависимость числа итераций метода БПВР от номера гармоники, $N_\phi = 128$

ром многосеточного метода. При этом не важно, является ли используемый метод наиболее быстрым из всех имеющихся, важно, чтобы он существенно уменьшал время счета нулевой гармоники потенциала, и, как следствие, уменьшалась нагрузка процессора, содержащего эту гармонику.

Метод блочной последовательной верхней релаксации вследствие своей простоты очень удобен для параллельной реализации. Кроме того, в большинстве случаев значение потенциала очень близко к тому, которое было получено на предыдущем шаге по времени. Тогда требуется лишь несколько итераций метода БПВР, и более сложные методы не нужны.

Метод GMRES (Generalized Minimal RESidual) [2] был использован как представитель класса методов подпространства Крылова и реализован с применением двух различных предобуславливателей: диагонального и блочно-диагонального. Количество итераций для этого метода в вычислительных экспериментах было значительно меньше, чем для метода БПВР, однако время счета оказалось больше. В частности, для сетки 400×400 число итераций метода GMRES равно 167 (3785 для БПВР), время счета 1057 с (520 с для БПВР). Использование более мощных предобуславливателей, например ILU-предобуславливателей, несомненно, приведет к сокращению числа итераций. Но в таком случае возрастет время выполнения одной итерации, поэтому это не приведет к радикальному уменьшению времени счета.

Многосеточный метод является теоретически наиболее быстрым, кроме того, он позволяет использовать особенности задачи для ускорения сходимости. Оба эти свойства подтвердились в ходе вычислительных экспериментов.

Шаг метода последовательной верхней релаксации [2] для системы можно представить в следующем виде:

$$H_{i-1/2,l}^{n-1/2}(m) = - \left[\frac{2}{h_z^2} + \frac{2}{h_r^2} + \frac{4}{h_\phi^2 r_{i-1/2}^2} \sin^2 \frac{\pi m}{N_\phi} \right]^{-1} \times$$

$$\times \left\{ -R_{i-1/2,l} + \frac{1}{h_r^2} \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} H_{i-3/2,l}^n(m) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} H_{i+1/2,l}^n(m) \right] \right\} +$$

$$+ \frac{1}{h_z^2} [d_l H_{i-1/2, l-1}^n(m) + u_l H_{i+1/2, l+1}^n(m)] \Big\},$$

$$H_{i-1/2, l}^n(m) = \omega H_{i-1/2, l}^{n-1/2}(m) + (1 - \omega) H_{i-1/2, l}^{n-1}(m),$$

$$i = 1, \dots, N_r, \quad m = 0, \dots, N_\phi - 1, \quad l = 1, \dots, N_z.$$

Так как матрица СЛАУ имеет блочную структуру, то итерационный процесс можно ускорить с помощью прогонки в радиальном направлении. Такая комбинация метода прогонки и последовательной верхней релаксации называется методом блочной последовательной верхней релаксации.

Реализация многосеточного метода. Наиболее быстрым для решения СЛАУ является многосеточный метод (сложность $O(N)$), поэтому именно он был использован для увеличения ускорения параллельной программы путем сокращения времени счета нулевой гармоники. Подробное описание многосеточного метода дано в [3]. Он достаточно известен, тем не менее не существует варианта, хорошо работающего во всех случаях. Этот метод содержит множество параметров, которые оказывают сильное влияние на производительность, однако не могут быть определены из теоретических соображений. Поэтому данный метод был реализован для расчета потенциала протопланетного диска в цилиндрической геометрии.

Многосеточный метод был реализован в виде так называемого полного многосеточного цикла [3]. Вначале задача решается на самой грубой сетке, затем выполняются: переход на более мелкую, несколько сглаживающих итераций, уточнение решения с помощью грубой сетки, возврат на мелкую сетку и т. д. Число узлов для сетки с номером p равно $(2^p - 1) \times (2^p - 1)$. Самая грубая сетка содержит только один узел, следующая менее грубая сетка – 9, далее – 49 и т. д.

Производительность многосеточного метода зависит от выбора операторов:

- оператора сглаживания для подавления высокочастотной погрешности;
- оператора сужения для перехода с мелкой сетки на грубую;
- оператора интерполяции для перехода с грубой сетки на мелкую.

Способностью подавления высокочастотной погрешности обладают многие итерационные методы, в частности метод Гаусса – Зайделя, методы подпространства Крылова и другие [3, 4]. Были проведены тестовые расчеты с методами Якоби, Гаусса – Зайделя, последовательной верхней релаксации и БПВР в качестве оператора сглаживания. Наибольшая скорость сходимости была достигнута при использовании метода БПВР.

Оператор линейной интерполяции при использовании в цилиндрической системе координат снижает качество коррекции решения с помощью грубой сетки, поэтому оператор интерполяции строится на основе оператора Лапласа для цилиндрической системы координат [5]. Значение в узле мелкой сетки, окруженном четырьмя узлами грубой сетки, вычисляется по формуле (для удобства записи опускаем номер волнового числа m и считаем $h_r = h_z$)

$$H_{i-1/2, l}^{p+1}(m) = \frac{1}{4} \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} H_{i-3/2, l}^p(m) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} H_{i+1/2, l}^p(m) \right] +$$

$$+ [d_l H_{i-1/2, l-1}^p(m) + u_l H_{i+1/2, l+1}^p(m)] \}, \quad i=1, \dots, N_r, \quad l=1, \dots, N_z - 1.$$

Здесь p – номер сетки. В узлах мелкой сетки, расположенных на координатных линиях (между двумя узлами грубой сетки), оператор интерполяции вычисляется взвешенным усреднением по этим двум узлам. Интерполяция по радиальному направлению и вдоль z -координаты выполняется соответственно следующим образом:

$$H_{i-1/2, l}^{p+1}(m) = \frac{1}{2} \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} H_{i-3/2, l}^p(m) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} H_{i+1/2, l}^p(m) \right],$$

$$i=1, \dots, N_r, \quad l=1, \dots, N_z - 1,$$

$$H_{i-1/2, l}^{p+1}(m) = \frac{1}{2} [d_l H_{i-1/2, l-1}^p(m) + u_l H_{i+1/2, l+1}^p(m)],$$

$$i=1, \dots, N_r, \quad l=1, \dots, N_z - 1.$$

Существует несколько вариантов реализации оператора сужения [3]. Простейший вариант – отбор значений в узлах, принадлежащих грубой и мелкой сетке. Но реализация оператора сужения в виде взвешенного усреднения по окружающим узлам мелкой сетки приводит к лучшим результатам. Как и в предыдущем случае, за основу берется оператор Лапласа

$$H_{i-1/2, l}^{p-1}(m) = \frac{1}{4} \left\{ \left[\frac{r_{i-1}}{r_{i-1/2}} H_{i-3/2, l}^p(m) + \frac{r_i}{r_{i-1/2}} H_{i+1/2, l}^p(m) \right] + [d_l H_{i-1/2, l-1}^p(m) + u_l H_{i+1/2, l+1}^p(m)] \right\}, \quad i=1, \dots, N_r, \quad l=1, \dots, N_z - 1.$$

Многосеточный метод дает выигрыш во времени по сравнению с методом БПВР для сетки 127×127 в 1,7 раза, для сетки 255×255 в 2,5 раза и для сетки 511×511 в 5,5 раза.

Итак, многосеточный метод используется при решении СЛАУ для нулевой гармоники потенциала на одном процессоре, чтобы уменьшить его загрузку по сравнению с другими процессорами.

Параллельный метод решения уравнения Пуассона. Если гармоники потенциала равномерно распределены по процессорам и СЛАУ для каждой из гармоник решается методом БПВР, то распределение загрузки процессоров будет неравномерным. Так как СЛАУ для нулевой гармоники обусловлена хуже всего, то процессор, содержащий эту гармонику, будет всегда перегружен по сравнению с другими.

Таким образом, время решения уравнения Пуассона ограничено снизу временем решения СЛАУ для нулевой гармоники потенциала. Эта граница достигается в предельном случае, если число процессоров равно числу гармоник потенциала. Время расчета нулевой гармоники потенциала при использовании многосеточного метода значительно сокращается (для сетки

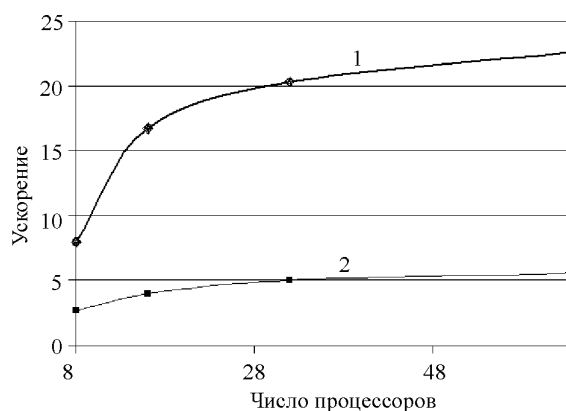


Рис. 2. Ускорение для параллельной программы: с использованием многосеточного метода (МС + БПВР) (1) и без него (БПВР) (2)

511×511 в 5,4 раза). При этом загрузка процессоров становится более равномерной. Дополнительно расчет нулевой гармоники выделяется на отдельный процессор. На рис. 2 показано ускорение параллельной программы решения уравнения Пуассона. Сравниваются два варианта: равномерное распределение гармоник по процессорам с решением СЛАУ для всех гармоник методом БПВР и комбинированный вариант, включающий в себя расчет нулевой гармоники многосеточным методом на отдельном процессоре и расчет всех остальных гармоник методом БПВР, которые равномерно разделены по процессорам.

Из рис. 2 видно, что использование многосеточного метода для расчета нулевой гармоники потенциала увеличивает ускорение при распараллеливании. Все вычисления проведены на мультикомпьютере МВС-1000М в Сибирском суперкомпьютерном центре СО РАН.

Заключение. В данной работе предложен новый параллельный метод решения уравнения Пуассона. Параллелизм метода достигается за счет использования преобразования Фурье, а ускорение при распараллеливании увеличивается вследствие применения многосеточного метода. В результате использования многосеточного метода и перераспределения нагрузки процессоров ускорение при распараллеливании увеличилось в 4 раза и стало равным 20 для 32 процессоров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Снытников В. Н., Вшивков В. А., Дудникова Г. И. и др. Численное моделирование гравитационных систем многих тел с газом // Вычисл. технологии. 2002. 7, № 3. С. 72.
2. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. М.: Мир, 2001.
3. Wesseling P. An Introduction to Multigrid Methods. N. Y.: John Willey & Sons, 1992.
4. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987.
5. Chan T. F., Wan W. L. Robust multigrid methods for nonsmooth coefficient elliptic linear systems // Journ. Comput. and Appl. Math. 2000. 123. P. 323.

Поступила в редакцию 11 ноября 2005 г.