

На правах рукописи

КУКШЕВА Эльвира Александровна

**АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ
ЗАДАЧ ДИНАМИКИ МНОГИХ ТЕЛ НА СУПЕРЭВМ**

05.13.18 „Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ“

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Новосибирск – 2008

Работа выполнена в Институте катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук

Научный руководитель кандидат физико-математических наук,
доцент Снытников Валерий Николаевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Федорук Михаил Петрович

доктор физико-математических наук,
доцент Свешников Виктор Митрофанович

Ведущая организация Новосибирский государственный
университет

Защита диссертации состоится “____” _____ 2008 г. в ____
часов на заседании диссертационного совета Д 003.005.01 при Институте
автоматики и электрометрии СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск,
просп. Академика Коптюга, 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИАиЭ СО РАН.

Автореферат разослан _____ 2008 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
д.ф.-м.н.



Насыров К.А.

Общая характеристика работы

Актуальность темы диссертации.

Проблема расчета траекторий движения многих тел, взаимодействующих между собой, часто встречается в различных областях физики и техники. Эта классическая задача возникает при изучении химических процессов, протекающих в природе, например, в задачах астрокатализа [9]. В этих задачах объектом изучения являются допланетные этапы и условия химических превращений вещества, ставшего основой для формирования солнечной системы и органических соединений на поверхности Земли. Одним из главных инструментов этого изучения является математическое моделирование с решением в качестве первого шага задачи динамики многих тел. Математическая модель этой задачи состоит из уравнений Власова-Лиувилля для функции распределения тел по пространству и скоростям и уравнения Пуассона для действующей на тела гравитационной силы. Эта задача решалась методом частица-сетка РМ. В этом методе на введенной сетке по распределению в пространстве большого числа частиц вычисляются значения плотности вещества. Затем, по этим значениям из решения уравнения Пуассона находятся сеточные значения потенциала и соответствующие силы, действующие на тела-частицы. Следом из уравнений движения для частиц определяются их новые координаты. Тем самым, распределение частиц в пространстве изменяется под действием самосогласованного поля, а также из-за других сил. Практически метод частиц представляет собой прямое моделирование динамики многих тел под воздействием собственного и внешнего полей.

Реализация такой модели в трехмерном случае называется 3D3V программой, поскольку используется три пространственные «D» и три скоростные «V» независимые переменные. Для эксплуатации этих программ с достаточно большим числом частиц, требуются значительные вычислительные ресурсы, поскольку необходимо отслеживать миллионы и миллиарды отдельных траекторий частиц. Размер вычислительной сетки в трехмерных расчетах должен быть не менее 100^3 узлов. Поэтому такие программы должны использовать ресурсы суперЭВМ. Но для этого необходимо создать высокоэффективные параллельные алгоритмы и программы, спроектированные так, чтобы в будущем их можно было относительно легко расширять.

При моделировании динамики многих тел РМ-методом возникает проблема постановки граничного условия для уравнения Пуассона. В исходных задачах оно ставится как нулевое значение гравитационного

потенциала на бесконечности. При моделировании в области конечного размера возникает проблема определения значения потенциала на границах при появлении тел-частиц вблизи границ.

Цели работы.

Разработать комплекс программ для решения задач динамики многих тел с применением суперЭВМ. В частности, необходимо было решить следующие задачи:

- разработать метод, позволяющий вычислять потенциал, используя фундаментальное решение уравнения Пуассона;
- реализовать эффективную параллельную процедуру данного метода как в декартовой, так и в полярной системе координат;
- разработать параллельную программу для решения 3D3V задачи многих тел в декартовой системе координат, использующую реализованную процедуру для задания граничных условий.
- использовать эту параллельную процедуру в задачах 3D2V для вычисления потенциала на плоскости. Сравнить результаты, полученные этой модифицированной реализацией 3D2V задачи с уже имевшимися программами 3D2V;
- разработать программу визуализации, ориентированную на представление динамики многих тел.

Научная новизна

работы состоит в следующем:

1. Разработан метод, реализующий дискретный аналог фундаментального решения уравнения Пуассона. Показано, что метод может быть востребован для решения уравнения Пуассона при использовании суперЭВМ с большим, свыше 20, числом процессоров.
2. Разработаны эффективные параллельные реализации этого метода в декартовой и полярной системах координат, которые используют свойство регулярности вычислительной сетки, сокращающее количество операций. Эти реализации использованы в программах 3D3V и 3D2V для решения трехмерных задач динамики многих тел.
3. Разработана параллельная программа для решения нестационарных трехмерных задач многих тел 3D3V.

4. Разработанная программа 3D3V использована для практических расчетов на суперкомпьютерах с целью поиска квазистационарного решения для диска с вращением. Установлено существование такого численного решения для самогравитирующего бесстолкновительного диска и определены его параметры.

Защищаемые положения.

1. Метод решения уравнения Пуассона, который основан на дискретном аналоге его фундаментального решения в декартовой и полярной системах координат, является эффективным при параллельной реализации.
2. Параллельная программа 3D3V для решения нестационарных задач многих тел в трехмерном пространстве.
3. Существует квазистационарное решение задачи о вращении частиц в виде диска, которое получено численно с помощью программы 3D3V на параллельных системах.

Достоверность результатов

подтверждена решением ряда модельных задач, а также сравнением с результатами, полученными другими авторами.

Научная и практическая ценность работы.

Разработанные программы использовались для установления пространственно трехмерных распределений параметров в самогравитирующих эллиптических системах и дисках. Было получено квазистационарное решение для задачи 3D3V. Работа велась в рамках программы Президиума РАН «Происхождение и эволюция звезд и галактик», «Происхождение и эволюция биосферы» (2004-2008 гг.), интеграционного проекта СО РАН №148 (2003-2005 гг.).

Апробация работы.

Основные научные результаты диссертации докладывались и обсуждались на семинарах «Математическое моделирование больших задач» в ИВМиМГ, на Всероссийской конференции «Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач» (Новороссийск, 22-27 сентября, 2008), на Всероссийской конференции по вычислительной математике KBM-2007 (Новосибирск, 18-20 июня, 2007), на 9-th International Conference Parallel Computing Technologies

PaCT-2007 (Переславль-Залесский, 3-7 сентября, 2007), на международном симпозиуме «Collective Phenomena in Macroscopic Systems» (Como, Italy 4-6 December, 2006) на международном рабочем совещании «Происхождение и эволюция биосферы» (БОЕ, Новосибирск, 26-29 июня, 2005).

Публикации.

Основное содержание диссертации отражено в 8 работах, список которых приведен в конце автореферата.

Объем и структура диссертации.

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы. Диссертация изложена на 128 страницах, включает библиографический список из 91 наименований работ. Рисунки, формулы и таблицы нумеруются по главам. Библиографические ссылки имеют сквозную нумерацию по всей работе.

Содержание диссертации

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, изложены основные результаты проведенных ранее исследований в области гравитационной физики, сформулирована цель диссертации, приведено краткое содержание работы и полученные результаты.

В **первой главе** приведен обзор задач гравитационной физики и астрокатализа, а также численные подходы к их решению, которые широко используются в настоящее время.

Вторая глава посвящена исследованию дискретного аналога фундаментального решения уравнения Пуассона с точки зрения его распараллеливания, а также точности по отношению к аналитическим решениям.

Гравитирующие массы распределены в ограниченной плоской области с плотностью $\rho(\tau')$. Они определяют потенциал, для которого запишем в безразмерных переменных уравнение Пуассона:

$$\Delta\varphi = 4\pi\rho \tag{1}$$

Оно имеет фундаментальное решение в виде:

$$\varphi(\vec{\tau}) = \int \frac{\rho(\tau')}{|\vec{R}|} d\tau' \tag{2}$$

где $\varphi(\vec{\tau})$ - это потенциал, который необходимо вычислить в точке $\vec{\tau}$, $|\vec{R}| = |\vec{\tau} - \vec{\tau}'|$ - расстояние между точками $\vec{\tau}$ и $\vec{\tau}'$. Для дискретного 2D случая в уравнении (2) заменим интеграл суммой и получим:

$$\Psi_{i',j'} = \sum_{i,j} \frac{M_{i,j}}{R_{i,j,i',j'}} \quad (3)$$

Пусть область решения определяется радиусом R_N в полярных координатах. Тогда в расчетной области введем равномерную 2D сетку потенциала $[\Psi]$ с шагами h_r и h_φ :

$$\begin{cases} r_i = h_r \cdot i, & i = 0, 1, \dots, N_r, & h_r = \frac{R_N}{N_r} \\ \varphi_j = h_\varphi \cdot j, & j = 0, 1, \dots, N_\varphi, & h_\varphi = \frac{2\pi}{N_\varphi} \\ \Psi_{i,j} = \Psi(r_i, \varphi_j) & \text{— значение сеточной функции потенциала в узлах сетки} \end{cases}$$

$\Psi_{i',j'}$ находится через суммирование вкладов точечных масс $M_{i,j}$, заданных в центрах ячеек сетки $[\Psi]$ по формуле (3). Массы составляют свою сетку $[M]$, сдвинутую относительно сетки потенциала как показано на рисунке 1. Таким

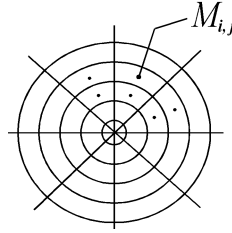


Рис. 1:

образом, $R_{i,j,i',j'}$ - расстояние от узла (i', j') сетки $[\Psi]$ до узла (i, j) сетки $[M]$. Поставленная задача определения потенциала в узлах сетки на плоскости прямо связана с методом крупных частиц решения уравнения Власова-Лиувилля [5]. Для задач, включающих решение последнего уравнения, традиционно ориентируются на точность выполнения законов сохранения и расчета полей лучше 1%. Далее будем называть **методом (3)** численный метод нахождения потенциала с помощью фундаментального решения уравнения Пуассона по формуле (3) на введенных сетках $[\Psi]$ и $[M]$.

Для исследования сходимости метода (3) использовались два теста сравнения с аналитическими решениями для бесконечно тонкого кольца и равномерного диска.

Тест с бесконечно тонким кольцом. Аналитическое решение для потенциала кольца определяется формулой:

$$\Psi(r) = \frac{-2 \cdot M}{\pi \cdot (r + R)} \cdot \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - 4 \cdot R \cdot \frac{r}{(r+R)^2} \cdot \sin(\Theta)^2}} \cdot d\Theta \quad (4)$$

Таблица Относительная погрешность в процентах на диске.

R	$N_r = 100,$ $N_\varphi = 100$	$N_r = 200,$ $N_\varphi = 200$	$N_r = 400,$ $N_\varphi = 400$	$N_r = 800,$ $N_\varphi = 800$
0,02	0,5378%	0,1991%	0,1036%	0,0523%
0,5	0,7600%	0,3785%	0,1895%	0,0948%
0,98	1,9130%	0,9992%	0,5022%	0,2501%
1	1,0691%	0,5414%	0,2715%	0,1359%
1,98	0,0001%	0,0002%	0,0001%	0,0000%

В расчетах кольцо имело радиус $R = 1,01$ и массу $M = 1$. Размерность сетки менялась от $(N_r = 100, N_\varphi = 100)$, $(N_r = 100, N_\varphi = 200)$, ..., до $(N_r = 100, N_\varphi = 1600)$. На рисунке 2 показана относительная погрешность метода в процентах для четырех сеток. Как следует из приведенных данных,

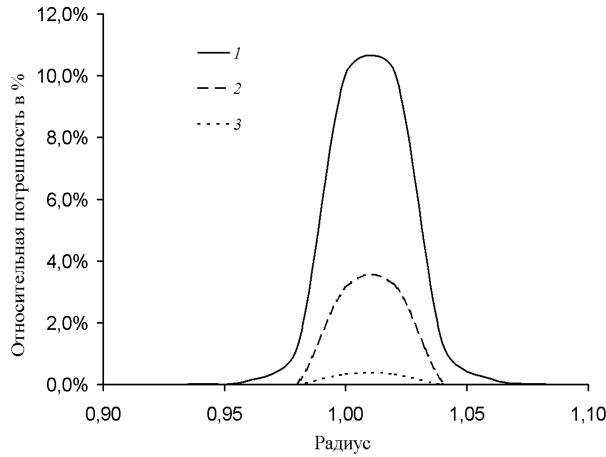


Рис. 2: Зависимость относительной погрешности от размера сетки для теста с кольцом: (1) - $N_r = 100, N_\varphi = 100$; (2) - $N_r = 100, N_\varphi = 200$; (3) - $N_r = 100, N_\varphi = 400$. Приведена область наибольших значений относительной погрешности.

есть сходимость к точному решению, и уже на третьей из приведенных сеток точность метода значительно превышает 1% во всей области.

Тест с диском. Аналитическое решение для потенциала равномерного диска определяется формулой:

$$\Psi(r) = \int_0^{R_d} \frac{-4 \cdot R \cdot M}{(R_d)^2 \cdot \pi \cdot (r + R)} \cdot \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - 4 \cdot R \cdot \frac{r}{(r+R)^2} \cdot \sin(\Theta)^2}} \cdot d\Theta dR \quad (5)$$

В расчетах радиус диска $R_d = 1$, его масса $M = 1$. В таблице представлены значения относительной погрешности, выраженной в процентах, полученного численного решения.

Из данных следует сходимость численного решения к аналитическому решению примерно с первым порядком. Наибольшее отклонение от точного

значения оказалось около края диска. Эта погрешность для сетки $N_r = 200, N_\varphi = 200$ меньше 1%, для сетки $N_r = 800, N_\varphi = 800$ составляет 0,25%.

Алгоритм распараллеливания. В программной реализации метода (3) задаются массивы потенциала $[\Psi]$ и значений точечных масс $[M]$. Для распараллеливания разрежем массив масс $[M]$ на np колец и/или секторов, где np - количество процессоров. В памяти каждого процессора k окажется «его» массив масс $M_k[N_{np}, N_\varphi]$ и полный массив потенциала $\Psi[N_r, N_\varphi]$. В результате, каждый процессор считает вклад в потенциал тех масс, которые он содержит в памяти по формуле (3). После чего массивы потенциалов из всех процессоров собираются в одном и там суммируются.

Параллельная программа для метода (3) была реализована на языке C++ с библиотекой MPI. На рисунке (Рис.3) представлена зависимость ускорения S_p от числа процессоров, где $S_p = \frac{T_1}{T_p}$, T_1 - время работы программы на 1-м процессоре, T_p - время работы программы на p процессорах. Ускорение вычислялось на тесте с диском. Из графика видно,

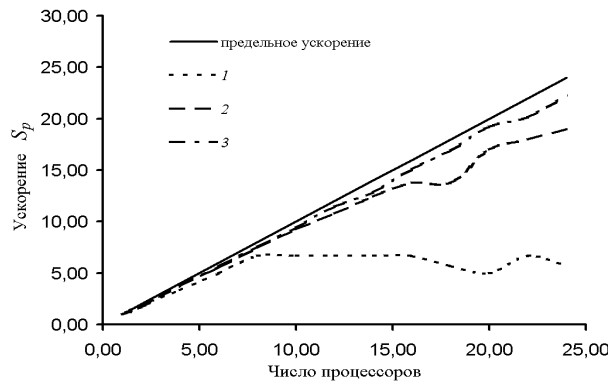


Рис. 3: Зависимость ускорения от числа процессоров для размерностей вычислительных сеток: (1) - $N_r = 100, N_\varphi = 100$; (2) - $N_r = 200, N_\varphi = 200$; (3) - $N_r = 500, N_\varphi = 500$

что параллельный алгоритм метода (3) имеет хорошее ускорение на данных тестах для всех представленных размерностей, и при увеличении размерности вычислительной сетки ускорение увеличивается.

В **третьей главе** диссертации представлена параллельная программа моделирования трехмерной динамики вещества в гравитационном поле, 3D3V.

Система уравнений гравитационной физики без столкновений состоит из кинетического уравнения Власова-Лиувилля и уравнения Пуассона для потенциала гравитационного поля. Уравнение Власова-Лиувилля в приближении усредненного самосогласованного поля записывается в виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \vec{a} \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = 0, \quad (6)$$

где $f(t, \vec{x}, \vec{v})$ - зависящая от времени одночастичная функция распределения по координатам и скоростям, $\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m} = -\vec{\nabla}\Phi$ - ускорение частиц единичной массы. Гравитационный потенциал Φ , в котором происходит движение, делится на две части:

$$\Phi = \Phi_1 + \Phi_2,$$

где Φ_1 в зависимости от моделируемых условий может представлять потенциал внешних сил, таких как центральное тело, галактическое гало, балдж. Вторая часть потенциала Φ_2 определяется совокупным распределением движущихся частиц и удовлетворяет уравнению Пуассона (G - гравитационная постоянная):

$$\Delta\Phi_2 = 4\pi G\rho, \quad (7)$$

Для изолированной системы граничное условие состоит в нулевом значении потенциала на бесконечности: $\Phi_{r \rightarrow \infty} = 0$.

В некоторый момент времени, который можно принять за начальный, частицы располагаются в расчетной области. Расположение может быть произвольным и, в частности, в виде плоского диска с осесимметричным распределением поверхностной плотности. Задание начальных скоростей частиц определяет движение диска вокруг центра области. В качестве параметров обезразмеривания выбираются начальный размер гравитирующей системы R_0 , ее масса M_0 , и гравитационная постоянная G . Отсюда:

$$V_0 = \sqrt{\frac{GM_0}{R_0}}, \quad t_0 = \frac{R_0}{V_0}, \quad \Phi_0 = V_0^2,$$

где V_0 , t_0 и Φ_0 - характерные величины скорости частиц, времени и потенциала. Все дальнейшие выкладки приведены в безразмерном виде.

Численные методы. Для решения кинетического уравнения Власова 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 РС. Уравнения движения отдельных частиц имеют вид

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{\vec{F}}{m_i}, \quad \frac{d\vec{x}_i}{dt} = \vec{v}_i,$$

Численное решение этих уравнений осуществляется по следующей схеме, где n - шаг по времени:

$$v_x^{n+1} = v_x^n + \tau F_x^n, \quad v_y^{n+1} = v_y^n + \tau F_y^n, \quad v_z^{n+1} = v_z^n + \tau F_z^n,$$

$$x^{n+1} = x^n + \tau v_x^{n+1}, \quad y^{n+1} = y^n + \tau v_y^{n+1}, \quad z^{n+1} = z^n + \tau v_z^{n+1}$$

Для нахождения сил, действующих на каждую частицу, используется интерполяция значения сеточной вектор-функции F в местоположение частицы с координатами центра x, y, z , а значения компонент сил, в свою очередь, вычисляются из значений сеточной функции потенциала.

Уравнение Пуассона в прямоугольной сеточной области с регулярной сеткой узлов $\{x_i = h_x i, y_k = h_y k, z_l = h_z l, i = 0, \dots, I, k = 0, \dots, K, l = 0, \dots, L\}$, о которой уже упоминалось выше, аппроксимируется схемой второго порядка:

$$\frac{\phi_{i+1,k,l} - 2\phi_{i,k,l} + \phi_{i-1,k,l}}{h_x^2} + \frac{\phi_{i,k+1,l} - 2\phi_{i,k,l} + \phi_{i,k-1,l}}{h_y^2} + \frac{\phi_{i,k,l+1} - 2\phi_{i,k,l} + \phi_{i,k,l-1}}{h_z^2} = 4\pi\rho_{i,k,l}$$

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.

В соответствии с *граничным условием* для изолированной системы, состоящем в убывании потенциала от точечной массы как r^{-1} до нуля на бесконечности, необходимо вычислять значение потенциала тел на границе. Это можно сделать с помощью фундаментального решения уравнения Пуассона. Его дискретный аналог записывается в виде:

$$\phi_{i',k',l'} = \sum_{i,k,l} \frac{m_{i,k,l}}{R_{i',k',l'}^{i,k,l}} \quad (8)$$

Значение сеточной функции потенциала $\phi_{i',k',l'}$ находится через суммирование вкладов точечных масс $m_{i,k,l}$ в центрах ячеек введенной сетки. $R_{i',k',l'}^{i,k,l}$ - расстояние от точечной $m_{i,k,l}$ массы до узла сетки, где вычисляется потенциал $\phi_{i',k',l'}$. В нашем 3D случае нужно вычислить потенциал на шести гранях области моделирования. Поэтому формула (8) дополняется следующими выражениями:

$$\begin{cases} i = 0, \dots, I, & k = 0, \dots, K, & l = 0, \dots, L; \\ i' = 0, \dots, I, & k' = 0, \dots, K, & l' = 0, \dots, L; \\ i' = 0, \dots, I, & k' = 0, & k' = K, & l' = 0, \dots, L; \\ i' = 0, & i' = I, & k' = 0, \dots, K, & l' = 0, \dots, L; \\ m_{i,k,l} = V\rho_{i,k,l}, & V = h_x h_y h_z \end{cases}$$

$\rho_{i,k,l}$ - плотность частиц в ячейке, V - объем ячейки. Таким образом, чтобы вычислить потенциал (8) на границе, необходимо определить сеточные

значения плотности и найти сеточные значения потенциала граничных ячеек.

В качестве *начальных условий* для координат и скоростей частиц могут быть выбраны произвольные распределения. Как пример, рассмотрим одну из наиболее интересных и физически содержательных фигур - модель плоского диска с осесимметричным распределением поверхностной плотности в виде:

$$\sigma(r) = \begin{cases} \sigma_0 e^{-\frac{r}{R_0}}, & r \leq R_0 \\ 0, & r > R_0 \end{cases} \quad (9)$$

R_0 - начальный радиус диска. В декартовых координатах $r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$, $z = z_0$, где x_0, y_0, z_0 - центр области. Начальные скорости модельных частиц в диске заданы в соответствии с условием их вращения вокруг центра области. В добавок к этому, в начальный момент времени всем трем компонентам скорости задается разброс по нормальному закону с дисперсиями dv_r, dv_φ, dv_z .

Параллельная реализация задачи (6),(7) использует 7 трехмерных массивов для хранения сеточных значений функций и 6 одномерных массивов для хранения координат и скоростей порядка 10^6 - 10^9 частиц. Параллельный алгоритм состоит в последовательном выполнении следующих основных блоков, каждый из которых в свою очередь 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.

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 256^3 , 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 реализовано с помощью библиотеки FFTW, которая позволяет параллельно выполнять многомерные преобразования Фурье для комплексных чисел на многопроцессорных машинах с распределенной памятью и MPI. При распараллеливании 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. Вычисление потенциала по формуле (8) происходит на 6 граничных плоскостях 3D сетки, но для этого используется весь 3D массив. Оценим трудоемкость вычислений. Для одной плоскости число операций $\sim 8n^5$, где n^3 - число узлов сетки. Сюда входят операции нахождения расстояния, деления и сложения. Для снижения трудоемкости данной реализации был применен набор приемов. Первый - распараллеливание. Массив плотности разбивается на блоки по числу процессоров N , и каждый процессор вычисляет вклад своей части массива плотности в значение потенциала. Затем происходит пересылка и суммирование вкладов. Пересылаются только те плоскости, для которых выполняются вычисления. Это сокращает число операций примерно в N раз. Используя свойство расчетной сетки (Рис.4(a)), когда $OA = O_1A_1$ и $OB = O_1B_1$, можно

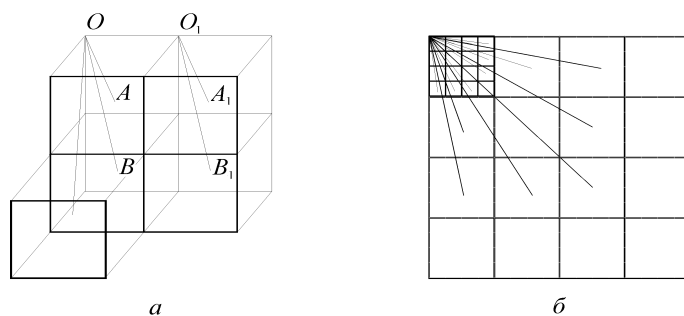


Рис. 4:

сэкономить время на вычислении расстояний между узлами сетки. Все эти расстояния можно вычислять при инициализации программы и хранить

в дополнительном массиве, откуда в процессе счета можно доставать необходимое значение. Этот же массив можно использовать на всех шагах по времени. Число операций при этом, учитывая распараллеливание, сокращается примерно до $\frac{3n^5}{N}$. Для еще большего ускорения на введенную вычислительную сетку можно наложить более грубую сетку, на которой и вычислять потенциал по формуле (8). При этом для вычисления вкладов соседних масс использовать мелкую сетку, а для дальних масс - грубую, как показано на рисунке 4(б), 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 $(\frac{n}{k})^3$, где k^3 - размерность маленького массива расстояний до ближних масс, а $(\frac{n}{k})^3$ - размерность массива расстояний для дальних масс. Получающееся в результате всех модификаций число операций, можно примерно оценить как: $\frac{9n^5}{Nk^2} + \frac{2n^2}{k^2}$. Значение k должно находиться в разумном интервале, с учетом сохранения точности вычислений. В реализованной программе $k \leq \sqrt{n}$, а введенные массивы вместе обычно получают примерно в 2000 раз меньше основных 3D массивов.

Ускорение параллельной программы. Рисунок 5 показывает ускорение параллельной программы на сетке 128^3 и 10^8 частицами.

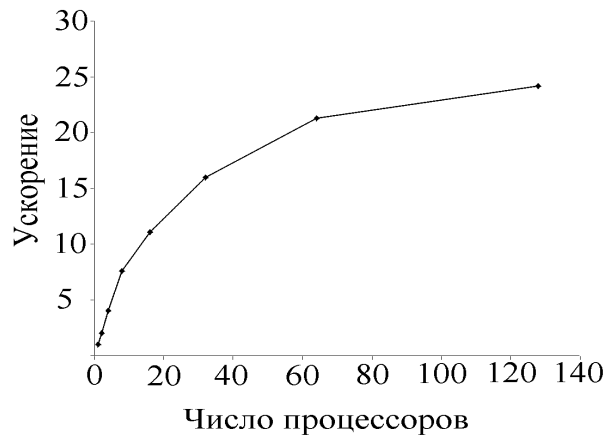


Рис. 5: Ускорение параллельной программы 3D3V на сетке 128^3 и 10^8 частицами. Остальные параметры расчета следующие: начальный радиус диска равен 1, его масса - 1, масса центрального тела - 0, дисперсии $dv_r = 0.5$, $dv_\varphi = 0.25$, $dv_z = 0.08$, размер расчетной области 20^3 . Как следует из рисунка, при числе процессоров более 100 рост ускорения составляет не более 15% для данных численных параметров.

Четвертая глава посвящена параллельной программе моделирования динамики тел на плоскости. Рассматривается численная модель 3D2V задачи, состоящая из уравнения Пуассона для гравитационного поля, уравнения Власова для крупных частиц и газодинамических уравнений. Эта задача уже была решена [5]. Целью работы было заменить метод вычисления гравитационного потенциала в этой задаче и сравнить результаты,

полученные обеими программами. В данной реализации гравитационный потенциал на плоскости находился методом, описанным на странице 6, а в предыдущей реализации он вычислялся комбинированным методом [5]. В результате, были проведены расчеты на суперЭВМ по обоим программам с широким изменением счетных и физических параметров. На основании выполненных исследований можно заключить, что смена вычислительного метода для уравнения Пуассона в задаче 3D2V влияет на детали получаемых результатов. Но в целом поведение системы сохраняется: при одинаковых входных параметрах по обоим программам получаются одинаковые с физической точки зрения результаты.

В **пятой главе** описывается программа визуализации Gala, специально разработанная для представления результатов моделирования задач гравитационной физики, главным образом в виде фильмов. После небольшого введения, описываются общие принципы работы программы, интерфейс Gala, перечислены доступные графические режимы, описаны допустимые в Gala форматы входных данных. Gala - законченный программный продукт. В настоящий момент она интенсивно используется и автором и коллегами, работающими в данной области.

В **шестой главе** диссертации представлены результаты численных экспериментов. Для 3D3V задачи приведено квазистационарное решение, эллипсоиды вращения, модельная задача распада гравитирующей среды на сгустки и т.д. Полученное квазистационарное решение системы (6),(7) представлено на рисунке 6. Время $T = 8$, начальный радиус диска равен 1, его масса - 1, масса центрального тела - 0, дисперсии $dv_r = 0.5$, $dv_\varphi = 0.25$, $dv_z = 0.08$. Расчет был выполнен на 32 процессорах, размер расчетной области 20^3 , размерность вычислительной сетки 128^3 , число модельных частиц 10^8 .

В **заключении** перечислены основные результаты, полученные в работе и выводы.

Основные результаты работы.

1. Показано, что реализация метода дискретного аналога фундаментального решения уравнения Пуассона может быть применена для решения уравнения Пуассона на параллельных системах с большим, свыше 20, числом процессоров.
2. Разработаны эффективные параллельные реализации этого метода в декартовой и полярной системах координат, которые используют свойство регулярности вычислительной сетки, чтобы сократить

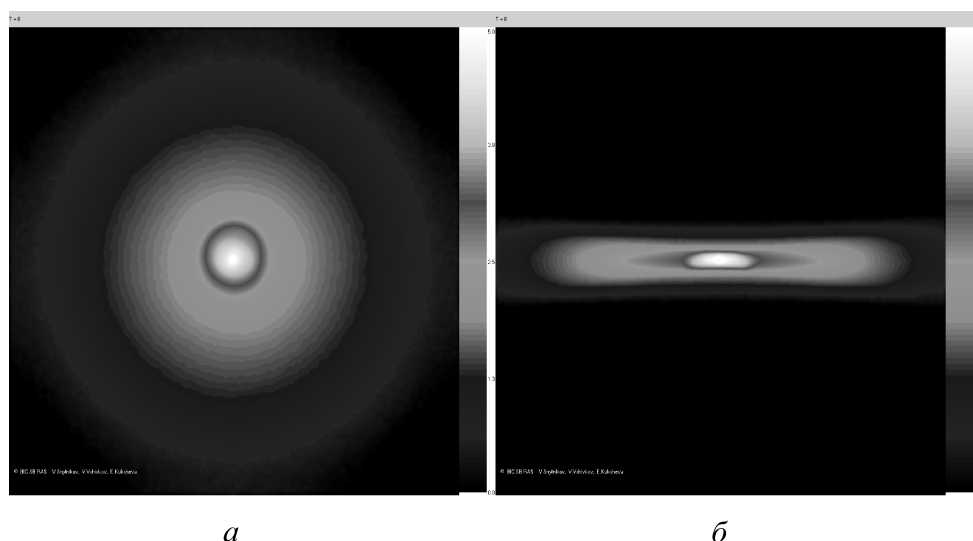


Рис. 6: Распределение логарифма поверхностной плотности вещества для момента времени $T = 8$ (а) - в экваториальной, (б) - в меридианальной плоскости диска.

количество операций. Эти реализации использованы в программах 3D3V и 3D2V для решения трехмерных задач многих тел.

3. Разработана параллельная программа для решения трехмерных задач многих тел 3D3V, легко переносимая между различными видами кластеров.
4. Проведен ряд расчетов на суперкомпьютерах с целью поиска квазистационарного решения для диска с вращением. В результате установлено существование численного квазистационарного решения для самогравитирующего бесстолкновительного диска.

Основное содержание диссертации опубликовано в работах:

- [1] Э.А. КУКШЕВА, В.Н. СНЫТНИКОВ Параллельный алгоритм и программа Key7D для решения нестационарных трехмерных задач гравитационной физики. // Вычислительные технологии, Том 12, №1, 2007, с. 35-44
- [2] S.KIREEV, E.KUKSHEVA, A.SNYTNIKOV, N.SNYTNIKOV, V.VSHIVKOV Strategies for Development of a Parallel Program for Protoplanetary Disc Simulation // PaCT 2007, LNCS 4671, pp. 128-139, 2007.
- [3] КУКШЕВА Э.А., СНЫТНИКОВ В.Н. Параллельная реализация фундаментального решения уравнения Пуассона // Вычислительные технологии, Т. 10, №4, 2005, с. 63-71.

- [4] 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
- [5] СНЫТНИКОВ В.Н., ВШИВКОВ В.А., КУКШЕВА Э.А., НИКИТИН С.А., НЕУПОКОЕВ Е.В., СНЫТНИКОВ А.В. Трехмерное численное моделирование нестационарной гравитирующей системы многих тел с газом // Письма в астрономический журнал. 2004, Т.30, №2, с.146-160.
- [6] ВШИВКОВ В.А., КУКШЕВА Э.А., НИКИТИН С.А., СНЫТНИКОВ А.В., СНЫТНИКОВ В.Н. О параллельной реализации численной модели физики гравитирующих систем // Автометрия, т. 39, №3, 2003, с.115-123.
- [7] E.A.KUKSHEVA, V.E.MALYSHKIN, S.A.NIKITIN, A.V.SNYTNIKOV, V.N.SNYTNIKOV, V.A.VSHIVKOV Numerical Simulation of Self-Organization in Gravitationally Unstable Media on Supercomputers // Lectures in notes. Proc. 7th Int. Conf. PaCT 2003, Nizhni Novgorod, Russia, September 15-19. Springer-Verlag, Berlin, pp. 354-368, 2003
- [8] V.N. SNYTNIKOV, E.A. KUKSHEVA Studying Instability of 3D Collisionless Systems on Stochastic Trajectories // COLLECTIVE PHENOMENA IN MACROSCOPIC SYSTEMS Proceedings of the Workshop Villa Olmo, Como, Italy 4 - 6 December 2006.

Цитируемая литература

- [9] В.Н. СНЫТНИКОВ Абиогенный допланетный синтез пребиотического вещества. // Вестник Российской Академии Наук, Том 77, №3, с. 218-226, 2007.