

Параллельные алгоритмы и технологии решения краевых задач на квазиструктурированных сетках при моделировании электронно-оптических систем *

В.М. Свешников

*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН*

Аннотация

Важным звеном в моделировании электронно-оптических систем, формирующих интенсивные пучки заряженных частиц, является расчет потенциала электрического поля, который сводится к решению уравнения Пуассона в геометрически сложной расчетной области с резко неоднородной правой частью. Предложен новый вариант метода декомпозиции расчетной области на подобласти, сопрягаемые без наложения, с условиями типа Дирихле-Дирихле для решения краевых задач, который базируется на непосредственной аппроксимации уравнения Пуанкаре-Стеклова на интерфейсе при помощи системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Элементы матрицы СЛАУ можно не вычислять явно, а использовать лишь ее действие на некоторое приближение, что дает итерационный метод по подобластям. Расчеты в подобластях проводятся на адаптивных квазиструктурированных сетках, состоящих из прямоугольных локально-модифицированных подсеток. Рассмотрены технологические особенности реализации данного подхода при решении краевых задач на многопроцессорных суперЭВМ.

1 Введение

Математически проблема моделирования электронно-оптических систем состоит в решении нелинейной самосогласованной задачи, включающей в себя расчет электрического и магнитного полей, траекторий движения заряженных частиц, объемного заряда и собственного магнитного поля, создаваемых пучком частиц [1]. Для ее решения применяются итерационные процессы по нелинейности, на каждом шаге которых решается линеаризованная краевая задача для уравнения Пуассона, из которого находится потенциал электрического поля [2]. Такие задачи характеризуются сложной геометрией расчетной области и резкой неоднородностью пучка. Использование в данном случае простых структурированных прямоугольных сеток упрощает расчеты, но требует введения неоправданно большого количества узлов для поддержки структурированности. Неструктурированные непрямоугольные сетки позволяют отследить неоднородность пучка, но требуют хранения громадного объема вспомогательной информации. Кроме того, при этом резко возрастает трудоемкость решения вспомогательной задачи об определении принадлежности заданной точки сеточному элементу, к которой происходит многократное обращение при интегрировании уравнений движения. Компромиссным вариантом, сочетающим простоту использования с адаптивными свойствами, являются квазиструктурированные прямоугольные локально-модифицированные сетки, предложенные в работе [3].

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 12-01-00076) и СО РАН (интеграционные проекты 104, 126, 130)

Решение краевой задачи для уравнения Пуассона проводится методом декомпозиции области на подобласти, на которые разбивается расчетная область макросеткой при построении квази-структурированной сетки. Существенным является то, что подсетки могут быть несогласованными. Метод декомпозиции области служит основным инструментом распараллеливания решения краевых задач на многопроцессорных суперЭВМ и изложен, например, в работах [4, 5]. Характерным для них является применение метода конечных элементов и множителей Лагранжа для несогласованных сеток, что приводит к решению системы уравнений с седловой точкой. Отметим также работу [6], в которой построен проекционный метод декомпозиции, основанный на прямой аппроксимации уравнения Пуанкаре – Стеклова на границе сопряжения подобластей (интерфейсе) при помощи метода конечных элементов.

В настоящей работе предлагается конечно-разностный подход к построению метода декомпозиции, основанный на непосредственной аппроксимации уравнения Пуанкаре – Стеклова при помощи функций Грина, который дает простой параллельный алгоритм проведения расчетов. Элементы матрицы СЛАУ, к которой приводит предлагаемая аппроксимация явно не вычисляются, а используется лишь ее действие на какой-либо вектор в итерационном процессе по подобластям. Для этих целей наиболее подходят быстросходящиеся итерационные методы в подпространствах Крылова. Используя разбиение на подобласти как макросетку, можно получить хорошее начальное приближение, что значительно сокращает число итераций, необходимых для достижения заданной точности.

Приводятся технологические особенности распараллеливания данного подхода при решении краевых задач на многопроцессорных суперЭВМ.

Настоящая работа является развитием работ автора [7, 8].

2 Постановка задачи и описание алгоритма декомпозиции

Пусть требуется найти функцию $\varphi(T)$, являющуюся решением краевой задачи

$$\begin{aligned} \Delta\varphi(T) &= g(T), \quad T \in D, \\ l\varphi(T)_{\Gamma} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где D – расчетная область, Γ – ее граница ($D \cup \Gamma = \bar{D}$), Δ – оператор Лапласа, l – оператор граничных условий, T – точка наблюдения. (рассматривается двумерная область). В дальнейшем мы будем предполагать существование и единственность достаточно гладкого решения задачи (1).

Разобьем область D на заданное число N_D подобластей D_K ($K = \overline{1, N_D}$) и обозначим через $\gamma_{n,m}$ ($n \neq m, \quad n, m = \overline{1, N_D}$) границу сопряжения подобластей D_n и D_m , причем положим $\gamma_{n,m} = \gamma_{m,n}$. Обозначим через Λ множество пар индексов n, m , которые определяют неповторяющиеся, непустые множества $\gamma_{n,m}$. Пусть T_P ($P = \overline{1, N_P}$) – точки пересечения границ $\gamma_{n,m}$ (макроузлы), N_P – число макроузлов, а $\gamma = \bigcup_{n,m \in \Lambda} \gamma_{n,m}$ – объединение этих границ. Тогда справедливо равенство

$$D = \bigcup_{K=1}^{N_D} D_K \bigcup_{P=1}^{N_P} T_P \bigcup \gamma.$$

Запишем на γ уравнение Пуанкаре-Стеклова

$$d_n(w_{n,m}) - d_m(w_{n,m}) = 0, \quad (2)$$

где $w_{n,m}$ – функция, определенная на $\gamma_{n,m}$, $d_r(w_{n,m}) = \left(\frac{\partial \varphi(w_{n,m})}{\partial \vec{n}} \right)_i$ ($r = n, m$), \vec{n} – нормаль к $\gamma_{n,m}$, а величины в скобках относятся соответственно к подобластям D_n и D_m . Направление нормали

в данном случае не важно, но для определенности положим, что \vec{n} – это внутренняя нормаль по отношению к D_n .

Уравнение (2) будем решать приближенно. Для этого построим на $\gamma_{n,m}$ сетку $\omega_{n,m} = \{T_k^{(n,m)} \in \gamma_{n,m}, k = \overline{1, M_{n,m}}\}$ с шагами $h_k^{(n,m)} = s(T_{k+1}^{(n,m)}) - s(T_k^{(n,m)}) > 0, k = \overline{0, M_{n,m}}$, где $M_{n,m}$ – заданное целое число, а $s(T_k^{(n,m)})$ – длина отрезка $[T_0^{(n,m)}, T_k^{(n,m)}]$ границы $\gamma_{n,m}$, отсчитываемая от точки $T_0^{(n,m)}$. Подчеркнем, что точки $T_0^{(n,m)}, T_{M_{n,m}+1}^{(n,m)}$ совпадают с макроузлами и не являются узлами сетки $\omega_{n,m}$.

Заменим задачу (2) отыскания функции $w_{n,m}$ непрерывного аргумента заменим приближенной задачей нахождения функции $v_{n,m}$ дискретного аргумента, состоящей в решении уравнений

$$f_{n,m} \equiv \tilde{d}_n - \tilde{d}_m = 0, \quad n, m \in \Lambda. \quad (3)$$

Здесь $\tilde{d}_i = \{\tilde{d}_k^{(r)}\}$ – вектор с компонентами $\tilde{d}_k^{(r)} = \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}(v_{n,m})}{\partial \vec{n}}\right)_k^{(r)}$, $r = n, m, k = \overline{1, M_{n,m}}$, $\tilde{\varphi}$ – решение приближенной задачи во всей области D . Введем сетку $\omega = \bigcup_{n,m \in \Lambda} \omega_{n,m}$, на которой определим вектор f как объединение векторов $f_{n,m}$. Дополнив ее макроузлами, образуем сетку $\bar{\omega} = \{\omega, T_1, T_2, \dots, T_P\}$ и вектор v в ее узлах. Введем единую нумерацию $k = \overline{1, M+P}$, где $M = \sum_{n,m \in \Lambda} M_{n,m}$, для всех узлов сетки $\bar{\omega}$. В силу линейности исходной задачи величины $f_i = f_i(v_1, v_2, \dots, v_M, v_{M+1}, \dots, v_{M+P})$ являются линейными функциями, которые можно записать как

$$f = Av + b, \quad (4)$$

где $A = \{a_{i,j}, i = \overline{1, M}, j = \overline{1, M+P}\}$ – прямоугольная матрица, а $f = \{f, i = \overline{1, M}\}$, $b = \{b_i, i = \overline{1, M}\}$, $v = \{v_j, j = \overline{1, M+P}\}$ – векторы. Тогда уравнения (3) представляются в виде системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$Av + b = 0. \quad (5)$$

Дополнив (5) уравнениями в макроузлах

$$(L^{(P)}v)_j = g_j, \quad j = \overline{M+1, M+P},$$

где $L^{(P)}$ – аппроксимация исходного дифференциального оператора на сеточном шаблоне, включающем узлы сетки ω и один из макроузлов, получим СЛАУ

$$\bar{A}v + \bar{b} = 0, \quad (6)$$

с квадратной матрицей \bar{A} порядка $M+P$, и вектором $\bar{b} = (b, g)'$.

Из формулы (4) следует, что вектор b можно вычислить из решения исходной краевой задачи, положив в узлах ω искомую функцию равной нулю. Элементы матрицы \bar{A} также можно вычислить, полагая в (4) в качестве v функцию, равную 1 в одном узле и 0 – в остальных, то есть вычисляя функции Грина в подобластях. С другой стороны, элементы матрицы \bar{A} можно не вычислять, а использовать лишь действие этой матрицы на какой-либо вектор согласно формуле (4). Тогда решение системы уравнений (6) проводится итерационным методом, использующим данное действие и сам вектор. Таким требованиям удовлетворяет семейство быстросходящихся итерационных методов в подпространствах Крылова, изложенных в монографии [9]. На каждом приближении ξ при этом решаются краевые задачи в подобластях D_K с условиями Дирихле на γ , которые определяются как $u^{(\xi)}|_\gamma = Sv^{(\xi)}$, где S – оператор интерполирования. Число итераций может быть существенно сокращено путем построения хорошего начального приближения $v^{(0)}$. Для этого решается исходная краевая задача на макросетке, координатные линии которой суть линии разбиения на подобласти, и полученное решение интерполируется в узлы сетки ω .

3 Параллельные технологии проведения расчетов

Распараллеливанию в первую очередь подлежит итерационный процесс по подобластям, который занимает подавляющую часть времени решения всей задачи. При решении подзадач в подобластях сеточными методами важным звеном является отображение сеточных данных на вычислительную сеть. Обычно принятый способ отображения: одна подобласть – один процессор в данном случае не эффективен, так как подобласти могут содержать различное число узлов, в которых вычисляются значения искомой функции (в дальнейшем – счетных узлов), что приводит к разбалансировке загрузки процессоров. Поэтому подобласти группируются в объединения U_l , $l = \overline{1, L}$, где L – известное число, с целью обеспечения приблизительно равной загрузки процессоров. Для этого в каждое объединение $U_l = \bigcup_k \bar{\Omega}_{h,k}^{(l)}$ включаются такие подсетки $\bar{\Omega}_{h,k}^{(l)}$, которые давали бы в сумме $N_l = \sum_k N_k^{(l)}$ число счетных узлов $N_l \approx N_U$, где N_U – заданная величина, а $N_k^{(l)}$ – число счетных узлов в подобластях. Алгоритм группировки подобластей для идеальной балансировки должен строиться на решении задачи линейного программирования. При этом может оказаться, что в объединение включаются не только соседние подобласти, но и подобласти, разделенные подобластями из других объединений. Последнее обстоятельство может привести к значительному увеличению объема медленных операций пересылки в системах с разделенной памятью. Обмены не происходят между соседними подобластями одного объединения. В связи с этим был принят следующий алгоритм построения объединений. Определяется число N_U , которое может быть равно максимальному числу узлов в подобласти или вычисляться как $N_U = N_h/L$, где N_h – суммарное число счетных узлов во всех подсетках. Для каждой свободной, то есть не включенной ни в одно объединение, подобласти просматриваются свободные соседи. Количество узлов просмотренных подсеток суммируется. Если после просмотра k -й подсетки в l -м объединении окажется $N_l > N_U$, то процесс группировки заканчивается, причем при $N_l - N_U > 0.5N_k^{(l)}$ последняя подсетка не включается в данное объединение.

На текущем процессоре, который отвечает за одно объединение, выполняются следующие вычислительные работы: 1) вычисление искомой функции в подобластях, 2) расчет нормальных производных на сторонах подобластей, входящих в объединение, 3) вычисление разностей производных (3) на смежных сторонах подобластей, 4) реализация очередного шага итерационного процесса по подобластям. На каждом из перечисленных технологических этапов происходит обмен информацией с соседними объединениями. Здесь следует отметить, что, несмотря на некоторое усложнение алгоритмов и технологии распараллеливания по сравнению с расчетами на равномерных сетках, рассмотренный подход оправдан, так как позволяет проводить декомпозицию области, исходя из физических особенностей исходной краевой задачи.

Литература

1. Сыровой В.А. Введение в теорию интенсивных пучков заряженных частиц. М.: Энергоатомиздат. 2004. 552 с.
2. Свешников В.М. Повышение точности расчета интенсивных пучков заряженных частиц // Прикладная физика. 2004. № 1. С. 55-65.
3. Свешников В.М., Беляев Д.О. Построение квазиструктурированных локально-модифицированных сеток для решения задач сильноточной электроники // Вестник ЮУрГУ. 2012. № 40. С.118-128.
4. Quarteroni A, Valli A. Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. Oxford: Clarendon Press. 1999. 360 p.

5. Василевский Ю.В., Ольшанский М.А. Краткий курс по многосеточным методам и методам декомпозиции. М.: Изд-во МГУ. 2007. 103 с.
6. Agoshkov V.I., Ovtchinnikov E. Projection decomposition method // Math. Models Methods Appl. Sci. V. 4. P. 773-794.
7. Свешников В.М. Построение прямых и итерационных методов декомпозиции. Сибирский журнал индустр. матем. Т12, №3. 2009. С. 99-109.
8. Свешников В.М. Параллельные технологии решения краевых задач на квазиструктурированных сетках. // Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (20-25 сентября 2010 г., г. Новороссийск). М.: Изд-во МГУ, 2010. С. 238 – 241.
9. Ильин В.П. Методы и технологии конечных элементов. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ (ВЦ) СО РАН. 2007. 370 с.