В. А. Вшивков, И. В. Лобив, Ф. А. Мурзин

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ПОТОКОВ РАЗРЕЖЕННОЙ ПЛАЗМЫ¹

введение

Известные под общим названием методы "частиц в ячейках", или PIC-методы (Particles In Cells) [1], широко применяются в вычислительной математике при моделировании различных процессов.

Большой интерес представляет вопрос об эффективном распараллеливнии данного алгоритма.

В работе [2] содержится краткий обзор реализаций PIC-метода на параллельных ЭВМ. Из него следует, что возникают большие проблемы, связанные с балансировкой загрузки процессоров и сокращением коммуникационных издержек. Эти трудности обусловлены тем, что в процессе работы программы частицы могут переходить из одной пространственной подобласти в другую, поэтому через некоторое число шагов обычно производят перераспределение частиц по процессорам.

Процесс вычислений также значительно зависит от топологии вычислительной системы. Например, в работе [3] сделан вывод, что SOS коммерческая программа моделирования трехмерной электромагнитной плазмы — на MIMD-мультипроцессорах с распределенной памятью и массовыми параллельными вычислениями, в том числе на гиперкубе с большим количеством вершин, работает неэффективно.

В данной работе рассматривается простейшая параллельная архитектура, содержащая коммутатор определенного вида. Подробно описан процесс отображения алгоритма на вычислительную систему данной архитектуры. В рамках некоторых естественных предположений оценены время выполнения алгоритма в параллельном и последовательном случаях, а также коэффициент ускорения.

Все это позволило более четко понять ядро проблемы, основные трудности и наметить направления дальнейших исследований. Выводы приведены в конце статьи.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 01-01-794) и Министерства образования РФ.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ДИСКРЕТИЗАЦИЯ

Рассматривается задача о взаимодействии потоков разреженной плазмы в самосогласованных электромагнитных полях. Такие задачи возникают при изучении динамики солнечных вспышек, обтекании солнечным ветром магнитосферы Земли, взаимодействии летательных аппаратов с космической плазмой, активных экспериментах с облаками плазмы в космосе.

Полная система уравнений, используемая нами для решения поставленных задач, состоит из кинетического уравнения Власова для ионов, уравнения движения для электронной компоненты, а также уравнений Максвелла для элекромагнитного поля:

$$\begin{array}{l} \frac{\partial f_i}{\partial t} + \overline{v_i} \frac{\partial f_i}{\partial \overline{r_i}} + \frac{\overline{F}}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial \overline{v_i}} = 0, \\ \overline{F} = e(\overline{E} + \frac{1}{c}[\overline{v_i}B]), \\ m_e(\frac{\partial \overline{u_e}}{\partial t} + (\overline{u_e}\nabla)\overline{u_e}) = -e\overline{E} - \frac{e}{c}[\overline{u_e}\overline{B}], \\ rot\overline{B} = \frac{4\pi n}{c}(\overline{u_e} - <\overline{v_i}>), \\ rot\overline{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \overline{B}}{\partial t}, \\ div\overline{B} = 0. \end{array}$$

Область решения имеет форму параллелепипеда. В ней введена декартова система координат (x, y, z). Вся область разбита на одинаковые ячейки такой же формы с размерами h_x, h_y, h_z вдоль соответствующих направлений. Для повышения точности аппроксимации электромагнитных полей внутри ячейки используется их представление в сдвинутых сетках, показанное на рис. 1. Частицы, моделирующие плазму, располагаются внутри ячеек в соответствии с необходимой плотностью. Каждая частица имеет свою скорость, которая изменяется под действием электрического и магнитного полей. Друг с другом частицы не взаимодействуют.

Этап 0. На этом этапе производится рассылка начальных данных.

Этап 1. Находятся предварительные значения компонент магнитного поля *BX*, *BY*, *BZ* из уравнений

$$BX_{i-\frac{1}{2},l,k}^{m} = BX_{i-\frac{1}{2},l,k}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{c\tau}{2} \Big(\frac{EZ_{i-\frac{1}{2},l+\frac{1}{2},k}^{m} - EZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}^{m}}{h_{y}} - \frac{EY_{i-\frac{1}{2},l,k+\frac{1}{2}}^{m} - EY_{i-\frac{1}{2},l,k+\frac{1}{2}}^{m}}{h_{z}} \Big),$$



Рис. 1. Задание величин на сетке

$$\begin{split} BY_{i,l-\frac{1}{2},k}^{m} &= BY_{i,l-\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{c\tau}{2} \big(\frac{EX_{i,l-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{-EX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}}{h_{z}} - \\ &- \frac{EZ_{i+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}^{m} - EZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}}{h_{x}} \big), \\ BZ_{i,l,k-\frac{1}{2}}^{m} &= BZ_{i,l,k-\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{c\tau}{2} \big(\frac{EY_{i+\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{-EY_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}}}{h_{x}} - \\ &- \frac{EX_{i,l+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{-EX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}} - \frac{c\tau}{2} \big(\frac{EX_{i,l+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{-EY_{i-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}}}{h_{x}} - \\ &- \frac{EX_{i,l+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{-EX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}}}{h_{y}} \big). \end{split}$$

Здесь нижние индексы i, j, k показывают положение соответствующей величины на пространственной сетке в направлениях (x, y, z) соответственно. Верхний индекс m указывает шаг по времени, h_x, h_y, h_z — пространственные шаги по осям x, y, z.

Этап 2. По найденным значениям магнитных полей и значениям электрического поля на предыдущем слое вычисляются новые скорости частиц:

$$\begin{split} VX_{j}^{m+\frac{1}{2}} &= VX_{j}^{m-\frac{1}{2}} + \frac{\tau e}{m_{i}}[EX_{j}^{m} + \frac{1}{c}(\frac{VY_{j}^{m-\frac{1}{2}} + VY_{j}^{m+\frac{1}{2}}}{2} \times BZ_{j}^{m} - \\ &- \frac{VZ_{j}^{m-\frac{1}{2}} + VZ_{j}^{m+\frac{1}{2}}}{2} \times BY_{j}^{m})], \\ VY_{j}^{m+\frac{1}{2}} &= VY_{j}^{m-\frac{1}{2}} + \frac{\tau e}{m_{i}}[EY_{j}^{m} + \frac{1}{c}(\frac{VZ_{j}^{m-\frac{1}{2}} + VZ_{j}^{m+\frac{1}{2}}}{2} \times BX_{j}^{m} - \\ &- \frac{VX_{j}^{m-\frac{1}{2}} + VX_{j}^{m+\frac{1}{2}}}{2} \times BZ_{j}^{m})], \\ VZ_{j}^{m+\frac{1}{2}} &= VZ_{j}^{m-\frac{1}{2}} + \frac{\tau e}{m_{i}}[EZ_{j}^{m} + \frac{1}{c}(\frac{VX_{j}^{m-\frac{1}{2}} + VX_{j}^{m+\frac{1}{2}}}{2} \times BY_{j}^{m}) - \\ &- \frac{VY_{j}^{m-\frac{1}{2}} + VY_{j}^{m+\frac{1}{2}}}{2} \times BY_{j}^{m})]. \end{split}$$

Нижний индекс *j* указывает номер частицы. Значения напряжен-

ностей электрического и магнитного полей определяются для каждой частицы отдельно путем интерполяции по восьми значениям в ближайших к частице узлах пространственной сетки. Поскольку все сеточные величины заданы на сдвинутых относительно друг друга сетках, то интерполирующие множители для каждой величины различны. Формулы для определения скоростей записаны неявно, в виде системы линейных алгебраических уравнений, которая решается аналитически, что дает явные выражения для компонент скорости на новом временном слое.

Этап 3. Данный этап содержит несколько подэтапов.

Подэтап 3.1. Определяются координаты частиц на слое $(m + \frac{1}{2})$:

$$\begin{split} X_{j}^{m+\frac{1}{2}} &= X_{j}^{m} + \frac{\tau}{2} V X_{j}^{m+\frac{1}{2}}, \\ Y_{j}^{m+\frac{1}{2}} &= Y_{j}^{m} + \frac{\tau}{2} V Y_{j}^{m+\frac{1}{2}}, \\ Z_{j}^{m+\frac{1}{2}} &= Z_{j}^{m} + \frac{\tau}{2} V Z_{j}^{m+\frac{1}{2}}. \end{split}$$

Подэтап 3.2. Плотности заряда вычисляются по формуле

$$N^{m+\frac{1}{2}}(x,y,z) = \sum_{j} M_{j}R(x - X_{j}^{m+\frac{1}{2}})R(y - Y_{j}^{m+\frac{1}{2}})R(z - Z_{j}^{m+\frac{1}{2}}),$$

где M_j — заряды отдельных частиц, R — ядро РІС-метода. Для равно-мерной сетки с шагом h ядро R имеет вид:

$$R(x) = \begin{cases} 1 - |x|/h, & |x| < h, \\ 0, & |x| > h. \end{cases}$$

Из этой формулы видно, что функция R(x) отлична от нуля только на интервале длиной 2h. Поэтому суммирование ведется только по частицам, расстояние которых до узла сетки не превышает шага h.

Подэтап 3.3. Находим средние скорости частиц на сетке. Вычисление компонент средней скорости ионов (UX, UY, UZ) можно записать с помощью следующих формул:

$$\begin{split} UX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= (N_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})^{-1}\sum_{j}M_{j}VX_{j}^{m+\frac{1}{2}}R(x_{i}-X_{j}^{m+\frac{1}{2}})\times\\ &\times R(y_{l-\frac{1}{2}}-Y_{j}^{m+\frac{1}{2}})R(z_{k-\frac{1}{2}}-Z_{j}^{m+\frac{1}{2}}),\\ UY_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= (N_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})^{-1}\sum_{j}M_{j}VY_{j}^{m+\frac{1}{2}}R(x_{i-\frac{1}{2}}-X_{j}^{m+\frac{1}{2}})\times\\ &\times R(y_{l}-Y_{j}^{m+\frac{1}{2}})R(z_{k-\frac{1}{2}}-Z_{j}^{m+\frac{1}{2}}),\\ UZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} &= (N_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}})^{-1}\sum_{j}M_{j}VZ_{j}^{m+\frac{1}{2}}R(x_{i-\frac{1}{2}}-X_{j}^{m+\frac{1}{2}})\times\\ &\times R(y_{l-\frac{1}{2}}-Y_{j}^{m+\frac{1}{2}})R(z_{k}-Z_{j}^{m+\frac{1}{2}}). \end{split}$$

Этап 4. Координаты частиц на слое (m+1) определяются из следующих формул:

$$\begin{split} X_{j}^{m+1} &= X_{j}^{m} + \frac{\tau}{2} V X_{j}^{m+\frac{1}{2}}, \\ Y_{j}^{m+1} &= Y_{j}^{m} + \frac{\tau}{2} V Y_{j}^{m+\frac{1}{2}}, \\ Z_{j}^{m+1} &= Z_{j}^{m} + \frac{\tau}{2} V Z_{j}^{m+\frac{1}{2}}. \end{split}$$

Этап 5. Вычисляются окончательные значения компонент напряженности:

$$\begin{split} BX_{i-\frac{1}{2},l,k}^{m+\frac{1}{2}} &= BX_{i-\frac{1}{2},l,k}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{c\tau}{2} \Big(\frac{EZ_{i-\frac{1}{2},l+\frac{1}{2},k}^{-EZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}}{h_{y}} - \\ &- \frac{EY_{i-\frac{1}{2},l,k+\frac{1}{2}}^{-EY_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}}{h_{z}} \Big), \\ BY_{i,l-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} &= BY_{i,l-\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{c\tau}{2} \Big(\frac{EZ_{i-\frac{1}{2},l,k+\frac{1}{2}}^{-EZ_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}}{h_{z}} - \\ &- \frac{EZ_{i+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}^{m-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} - \frac{c\tau}{h_{z}} \Big(\frac{EZ_{i+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}{h_{x}} \Big), \\ BZ_{i,l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= BZ_{i,l,k-\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} - \frac{c\tau}{2} \Big(\frac{EZ_{i+\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{-EZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}}{h_{x}} \Big), \\ &- \frac{EZ_{i,l+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{-EZ_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}}{h_{y}} \Big). \end{split}$$

Этап 6. Вычисляются скорости электронов (VX, VY, VZ) :

$$\begin{split} VX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} &= UX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - (c/4\pi e N_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}) \times (\frac{BZ_{i,l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - BZ_{i,l-1,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - BZ_{i,l-1,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - C_{i,l-1,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - C_{i,l-1,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - C_{i,l-1,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - C_{i,l-1,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - C_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - C_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - C_{i,l-\frac{1}{2},k$$

Этап 7. Находится электрическое поле:

$$\begin{split} & EX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{c} (BY_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} VZ_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - BZ_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} VY_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}), \\ & EY_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{c} (BZ_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} VX_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} - BX_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} VZ_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}), \\ & EZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{c} (BX_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} VY_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} - BY_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}^{m+\frac{1}{2}} VZ_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}). \end{split}$$

В этих формулах компоненты электрического и магнитного поля и скорости электронов в точках, где определяются электричские поля, находятся как среднеарифметическое значений в соседних двух (для поля) или четырех узлах (для скорости), в которых они определены, например:

$$\begin{array}{l} BY_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}(BY_{i,l-\frac{1}{2},k} + BY_{i,l-\frac{1}{2},k-1}), \\ VZ_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{4}(VZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k} + VZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k-1} + VZ_{i+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k} + VZ_{i+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k-1}). \end{array}$$

На этом цикл вычислений заканчивается.

Итак, исходная постановка задачи в семимерном пространстве путем использования метода частиц свелась к более сложной постановке, но в трехмерном пространстве. Решение уравнения Власова заменилось решением уравнений движения для большого количества частиц.

Частицы и поля, описывающие физическую часть задачи, в алгоритме представляются двумя вычисляемыми объектами — множеством частиц и равномерной эйлеровой сеткой (узлами сетки являются вершины ячеек, на которые делится пространство моделирования). Каждая частица находится внутри определенной ячейки сетки.

2. ОТОБРАЖЕНИЕ АЛГОРИТМА НА ПАРАЛЛЕЛЬНУЮ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНУЮ СИСТЕМУ

Предполагаем, что размер сетки равен $N = (n_1+1) \times (n_2+1) \times (n_3+1).$

Считаем, что узлы сетки занумерованы от нуля до n_1, n_2, n_3 соответственно. Число частиц M >> N. Сформулируем требования на архитектуру ЭВМ, которая могла бы быть пригодна для реализации PIСметода.

2.1. Считаем, что каждой ячейке сетки соответствует процессор, который вычисляет напряженность электричского поля и другие параметры, связанные с данной ячейкой. Предполагаем, что число процессоров равно K и $n_1 \cdot n_2 \cdot n_3$ делится на K, т.е. $n_1 \cdot n_2 \cdot n_3 = l \cdot K = N^*$. Обозначим Π_i процессор с номером $i, 0 \le i \le K - 1$.

2.2. Ячейка характеризуется тройкой чисел $\langle i, j, k \rangle$, соответствующих левому нижнему ее углу. Предполагаем, что зафиксирована нумерация ячеек, т.е. взаимно-однозначная функция

$$\nu: \prod_{i=1}^{3} \{0, \dots, n_i - 1\} \to \{0, \dots, K - 1\},\$$

которая тройке $\langle i, j, k \rangle$ сопоставляет $\nu_{ijk} = \nu(i, j, k)$ — номер процессора, о котором идет речь в п. 2.1, и для любого k верно $|(\nu)^{-1}(k)| = l$.

Процессор с номером ν_{ijk} рассчитывает величины

$BX_{i-\frac{1}{2},l,k},$	$BY_{i,l-\frac{1}{2},k}$,	$BZ_{i,l,k-\frac{1}{2}},$
$UX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}},$	$UY_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}},$	$UZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k},$
$VX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}},$	$VY_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}},$	$VZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k},$
$EX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}},$	$EY_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}},$	$EZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k},$
$NX_{i,l-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}},$	$NY_{i-\frac{1}{2},l,k-\frac{1}{2}},$	$NZ_{i-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},k}.$

При вычислении некоторых величин требуются данные из соседних ячеек.

2.3. Для простоты считаем, что M делится на K и R = M/K. Каждый процессор будет рассчитывать данные в точности для R частиц. Распределение частиц по процессорам считаем фиксированным, например: процессор с номером ноль обрабатывает частицы с номерами $1, \ldots, R$, второй — с номерами $R + 1, \ldots, 2R$ и т.д. Обозначим $\pi(i)$ — множество номеров частиц, которые рассчитывает *i*-й процессор.

2.4. Обмен данными между процессорами производится через коммутатор, структуру которого не уточняем, но считаем, что если задана функция σ : $\{0, \ldots, K-1\} \rightarrow \{0, \ldots, K-1\}$, то коммутатор способен обеспечить связь всех процессоров Π_k с процессорами $\Pi_{\sigma(k)}, (0 \le k < K)$ одновременно в параллельном режиме, после чего произойдет передача данных. Структура алгоритма такова, что конфликты при записи исключены. Несущественно, происходят ли обмены между процессорами непосредственно или через общую память.

Архитектура ЭВМ, удовлетворяющая перечисленным выше условиям, показана на рис. 2.

При вычислении некоторых величин требуются данные из соседних ячеек, т.е. фактически из других процессоров.

Используя коммутатор, их можно получать в параллельном режиме.



Рис. 2. Структура вычислительной системы

Поясним, как это делается. Допустим, что процессор $\Pi_{\nu(i,l,k)}$ вычисляет величину $BX_{i-\frac{1}{2},l,k}$. Можно считать, что он "знает" (т.е. в нем хранятся) значения $\nu(i+1,l,k), \nu(i,l+1,k), \nu(i,l,k+1)$.

Возникают отображения

$$\sigma_{100} : \nu(i, l, k) \to \nu(i + 1, l, k),$$

$$\sigma_{010} : \nu(i, l, k) \to \nu(i, l + 1, k),$$

$$\sigma_{001} : \nu(i, l, k) \to \nu(i, l, k + 1).$$

Все процессоры Π_k , за исключением тех, которые ответственны за примыкающие к границе ячейки, через коммутатор могут одновременно подключиться к процессорам $\Pi_{\sigma_{i_1 i_2 i_3}(k)}$ и считать необходимые величины.

Например, подключившись к $\Pi_{\sigma_{010}(k)}$, можно считать величину $EZ_{i-\frac{1}{2},l+\frac{1}{2},k}$, необходимую для вычисления упомянутого выше $BX_{i-\frac{1}{2},l,k}$.

Трижды повторив подобные действия, все процессоры получат все необходимые для вычисления величины.

Опишем процесс обработки данных, касающихся частиц, в параллелльном режиме. Все процессоры одновременно производят сортировку частиц и предварительные вычисления.

Каждый процессор Π_k разбивает множество $\pi(k)$ на дизъюнктивные компоненты $\pi(k) = \bigcup_{\nu=1}^{N^*} \pi_{\nu}(k)$, где $\pi_{\nu}(k)$ — множество номеров частиц $\mu \in \pi(k)$, таких, что частица с номером μ находится в ячейке, имеющей номер ν .

Далее каждым процессором Π_k вычисляются величины

$$N_{\nu k}^{m+\frac{1}{2}}(x,y,z) = \sum_{j \in \pi_{\nu}(k)} M_j R(x - X_j^{m+\frac{1}{2}}) R(y - Y_j^{m+\frac{1}{2}}) R(z - Z_j^{m+\frac{1}{2}}).$$

При некоторых i, l, s имеем $\nu = \nu_{ils} = \nu(i, l, s)$. Величина $N_{\nu k}^{m+\frac{1}{2}}$ с точностью до коэффициента пропорциональности представляет собой часть суммы, которую необходимо вычислить, чтобы получить $N_{ils}^{m+\frac{1}{2}}$.

часть суммы, которую необходимо вычислить, чтобы получить $N_{ils}^{m+\frac{1}{2}}$. Легко видеть, что $N_{ils}^{m+\frac{1}{2}} = \sum_{k=0}^{N-1} N_{\nu k}^{m+\frac{1}{2}}$, т.е. другие части требуемой суммы находятся в других процессорах.

Далее требуется осуществить доступ к необходимым частичным суммам, что возможно сделать за K-1 подэтап.

Каждый процессор Π_k считывает у процессора $\Pi_{k'}$, $k' = k \oplus 1(modK)$, величину $N_{nk'}^{m+\frac{1}{2}}$.

Аналогично, Π_k считывает у процессора $\Pi_{k''}$,

 $k'' = k \oplus 2(modK)$, величину $N_{nk''}^{m+\frac{1}{2}}$.

Всего необходимо К – 1 подэтап.

По завершению всех подэтапов обмена каждый из процессоров будет иметь все необходимые данные для вычисления величин $N_{ils}^{m+\frac{1}{2}}$.

На рис. 3 приведена схема, показывающая зависимость по данным в описаном выше алгоритме. На схеме видно, какие данные необходимы, для вычисления той или иной величины.



Рис. 3. Схема зависимостей по данным

Входными данными являются E^m, X^m и $B^{m-\frac{1}{2}}, V^{m-\frac{1}{2}}$. По ним вычисляются E^{m+1}, X^{m+1} и $B^{m+\frac{1}{2}}, V^{m+\frac{1}{2}}$ соответственно. Все остальные величины промежуточные. Вблизи каждой величины стоит номер этапа, на котором она вычисляется.

В приведенную ниже таблицу включены все используемые величины, а также показано, на каком временном шаге они используются.

$m-\frac{1}{2}$	m	$m + \frac{1}{2}$	m+1
В	B	В	
V		V	
	E		E
	X	X	X
		N	
		U	
		\overline{V}	

3. ОЦЕНКИ ВРЕМЕНИ ВЫПОЛНЕНИЯ АЛГОРИТМА

Оценим время выполнения алгоритма в параллельном и последовательном случаях и коэффициент ускорения, допустив ряд естественных предположений. Обозначим t_i — время вычислений на *i*-м этапе в параллельном режиме, T_i — время вычислений на *i*-м этапе в последовательном режиме, $0 \le i \le 7$, $\kappa_i = T_i/t_i$ — коэффициент ускорения.

Заметим, что при вычислении скорости частицы, компонент поля и т.д. употребляется всякий раз конечное число операций, определяемое конкретной формулой, что позволяет учесть вклад этих вычислений соответствующими константами.

Можно также пренебречь временами, необходимыми для обменов, ввиду того, что время срабатывания коммутатора в параллельной системе часто бывает меньше времени доступа к памяти последовательной машины.

Для соответствующих этапов имеем:

0.	$t_0 = T_0.$		
1.	$t_1 = c_1 l,$	$T_1 = c_1 N^*,$	$\kappa_1 = K.$
2.	$t_2 = c_2 R,$	$T_2 = c_2 M,$	$\kappa_2 = K.$
3.1	$t_{3.1} = c_{3.1}R,$	$T_{3.1} = c_{3.1}M,$	$\kappa_{3.1} = K.$
3.2	$t_{3.2.1} = c_{3.2.1}R,$	$T_{3.2.1} = c_{3.2.1}M,$	$\kappa_{3.2.1} = K,$
	$t_{3.2.2} = c_{3.2.2} N^*,$	$T_{3.2.2} = 0.$	
3.3	$t_{3.3.1} = c_{3.3.1}R,$	$T_{3.3.1} = c_{3.3.1}M,$	$\kappa_{3.3.1} = K,$
	$t_{3.3.2} = c_{3.3.2} N^*,$	$T_{3.3.2} = 0.$	
4.	$t_4 = c_4 R,$	$T_4 = c_4 M,$	$\kappa_4 = K.$
5.	$t_5 = c_5 l,$	$T_5 = c_5 N^*,$	$\kappa_5 = K.$
6.	$t_6 = c_6 l,$	$T_6 = c_6 N^*,$	$\kappa_6 = K.$
7.	$t_7 = c_7 l,$	$T_7 = c_7 N^*,$	$\kappa_7 = K.$

Заметим, что этапы 3.2.2 и 3.3.2 в последовательном случае отсутствуют. С другой стороны, они осуществимы на последовательной машине, только если все частицы помещаются в оперативной памяти.

Суммарное время равно соответственно:

$$t = \sum_{i=1}^{7} t_i = \alpha l + \beta R + \gamma N^*,$$

$$\alpha = c_1 + c_5 + c_6 + c_7,$$

$$\beta = c_2 + c_{3.1} + c_{3.2.1} + c_{3.3.1} + c_4,$$

$$\gamma = c_{3.2.2} + c_{3.3.2},$$

$$T = \alpha N^* + \beta M = (\alpha l + \beta R)K.$$

Коэффициент ускорения:

$$\kappa = \frac{\alpha N^* + \beta M}{\alpha l + \beta R + \gamma N^*} =$$

$$= \frac{(\alpha l + \beta R)K}{\alpha l + \beta R + \gamma N^*} =$$

$$= K(1 - \frac{\gamma l}{\alpha l + \beta R + \gamma N^*}) =$$

$$= K(1 - \varepsilon(l, R, K)).$$

Ниже на графиках показана зависимость коэффициента ускорения для конкретных случаев.



Рис. 4. График зависимости коэффициента ускорения
 κ от числа используемых процессоров K

Пример 1. $\alpha = 20, \ \beta = 20, \ \gamma = 200,$ $N = K = 1, \dots, 1000,$ R = M/N = 100.

В данном примере количество ячеек равно количеству процессоров и меняется от 1 до 1000. График зависимости коэффициента ускорения κ от числа используемых процессоров K показан на рис. 4.

Пример 2.

График на рис. 5 показывает зависимость коэффициента ускорения от количества ячеек N и количества частиц M, при фиксированном числе процессоров K = 1000. Остальные параметры остались прежними.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из предыдущего пункта видно, что имеет место практически линейная зависимость коэффициента ускорения от входного параметра



Puc.5. График зависимости коэффициента ускорения
 κ от R=M/Nи числа процессоров
 K

задачи K. Это обусловлено тем, что в алгоритме отсутствуют этапы, на которых используются малоэффективные итерационные процессы, как, например, в работе [4].

Кроме того, коэффициент ускорения зависит также от констант α , β , γ , которые определяются сложностью вычислений, возникающих при расчете одной ячейки или одной частицы. В конечном итоге, эта сложность определяется сложностью соответствующих формул.

Отметим, что при увеличении α, β, γ эффективность вычислений, как правило, возрастает. С другой стороны, для большинства задач важных на практике, значения α, β, γ небольшие.

Можно выделить несколько возможных направлений дальнейших исследований.

Интересно было бы получить аналогичные оценки для других архитектур ЭВМ, например матричной и гиперкуба.

Большое практическое значение имеет исследование ситуации, когда данные, соответствующие частицам, не входят в суммарную локальную память процессоров. В этом случае приходится производить непрерывные обмены данными с внешними носителями.

Целесообразно развить исследования, учитывающие статистику распределения частиц. В этом случае следует говорить о математическом



Рис. 6. График зависимости є от числа процессоров К

ожидании времени исполнения алгоритма. При этом могут быть использованы различные методы теории информации, теории массового обслуживании, теории случайных блужданий и т.д.

Статистическая информация задается априорно или накапливается в процессе расчета. Такой подход может оказаться плодотворным для следующих случаев:

1) частицы сгруппированы в некоторой подобласти расчетной области;

2) частицы распределены более или менее равномерно, но потоки между ячейками небольшие;

3) скорости частиц небольшие.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 638 с.
- 2. Малышкин В.Э., Вшивков В.А., Краева М.А. О реализации метода частиц на мультипроцессорах. Новосибирск, 1995. 37 с. (Препр. / СО РАН. ВЦ; N 1052).
- 3. Christiansen J.P. Numerical simulation of hydrodynamics by the method of point vortices // J. Comp. Phys. 1973. Vol. 13, N 3. P.363-379.
- 4. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975. 392 с.