

Параллельные алгоритмы моделирования сильноточных ЭОС

В. П. Ильин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
г. Новосибирск, Россия

Рассмотрены алгоритмы распараллеливания вычислений при моделировании электрофизических процессов сильноточных электронно-оптических систем (ЭОС), описываемых системой дифференциальных уравнений Максвелла-Власова. Кратко описаны методы решения полевых и потоковых задач при расчетах самосогласованных нелинейных проблем. Проведен анализ критериев эффективности распараллеливания неявных методов переменных направлений с ускорением сопряженных направлений и методов больших частиц для трехмерных случаев. Приведены оценки коммуникационных потерь в разных вариантах декомпозиции областей и архитектур многопроцессорных вычислительных систем (ВС).

Распараллеливание алгоритмов на многопроцессорных ВС является безальтернативным средством повышения быстродействия и эффективности решения больших ресурсоемких задач, к которым относятся проблемы моделирования многомерных сильноточных электронно- и ионнооптических систем. Соответствующие математические постановки включают системы дифференциальных уравнений Максвелла и Власова, описывающих распределения электромагнитных полей и потоков заряженных частиц.

Здесь можно выделить ряд факторов и современных практических требований, возникающих при проектировании и исследовании приборов новой электронной техники, которые приводят к значительному повышению вычислительной сложности алгоритмов [1]:

необходимость высокой разрешающей способности (точности) численных методов расчета полей, в том числе при наличии разномасштабных деталей, сингулярностей и малых возмущений конструкций;

нелинейные взаимодействия в сильноточных электронных, ионных и плазменных потоках, приводящие зачастую к неустойчивым и неоднозначным физическим состояниям;

нестационарные процессы в высокочастотных и переходных временных областях, включая колебательные явления в многорезонаторных структурах.

Важно заметить, что производственные и технологические условия, связанные с проблемами надежности, долгоживучести и прочности электрофизических высокоэнергетических устройств приводят к необходимости решения фактически многодисциплинарных задач, где, помимо чисто электромагнитных явлений, требуется моделировать распределение температурных полей, термоупругих напряжений, а также взаимодействие корпускулярных потоков с материалами.

Вопросы распараллеливания алгоритмов в общем плане и для решения задач оптики заряженных частиц широко раскрыты в литературе [2, 3].

Ниже остановимся на принципах построения параллельных вычислений при решении взаимосогласованных задач расчета трехмерных электромагнитных полей и потоков заряженных частиц на основе аппроксимации дифференциальных уравнений методами конечных объемов (МКО) [4] и принципа декомпозиции областей. Системы алгебраических уравнений высокого порядка решаются обобщенными неявными методами переменных направлений с ускорением сопряженными градиентами [5, 6]. Распределения объемных зарядов и плотностей токов рассчитываются с помощью методов больших частиц, различные варианты которых описаны в работе [1].

В статье коснемся также аспектов распараллеливания, связанных с разработкой не методических (исследовательских) программ, а с созданием производственных (коммерческих) программных продуктов, ориентированных на массовое использование конечными пользователями и реализуемых в рамках современных вычислительно-информационных технологий (ВИТ).

Ниже приводятся особенности постановок рассматриваемых математических задач, краткое описание основных применяемых алгоритмов и анализируются критерии эффективности их распараллеливания.

Математические постановки задач

В общем случае система уравнений Максвелла имеет вид

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{B} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, & \operatorname{div} \vec{B} &= 0, & \vec{B} &= \mu \vec{H}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \vec{E} &= 4\pi\rho, \end{aligned}$$

где \vec{E}, \vec{H} — векторы напряженностей электрического и магнитного полей;

\vec{B} и \vec{j} — векторы магнитной индукции и плотности электрического тока;

μ и ρ — магнитная проницаемость и плотность объемного заряда, соответственно.

Функция распределения электронов и/или ионов $f_{i,e}$ с зарядами $q_{i,e}$ и скоростями $\vec{V}_{i,e}$ описывается уравнением Власова

$$\frac{\partial f_{i,e}}{\partial t} = \vec{V}_{i,e} \frac{\partial f_{i,e}}{\partial \vec{r}} + q_{i,e} \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{V}_{i,e}, \vec{B}] \right) \frac{\partial f_{i,e}}{\partial \vec{p}},$$

где радиус-вектор и импульс частицы связаны соотношениями

$$\vec{p} = m \left(1 - \frac{V^2}{c^2} \right)^{-1/2} \vec{V}, \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{V}, \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -m(E + [\vec{V}, \vec{B}]),$$

а плотности тока и заряда выражаются интегралами

$$\vec{j} = \sum_{i,e} q_{i,e} \int f_{i,e} \vec{V} d\vec{V}, \quad \rho = \sum_{i,e} q_{i,e} \int f_{i,e} d\vec{V},$$

и удовлетворяют уравнению неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0.$$

Характерным примером рассматриваемой задачи может служить электронно-оптическая система для генерации СВЧ-поля, включающая три основные части: источник тока (пушка) с катодом, сеткой, анодом, фокусирующими электродами и магнитами, далее — многорезонаторная область формирования высокочастотных колебаний и, наконец, коллектор, обеспечивающий торможение пучка. В различных случаях моделирование требует учета многочисленных физических факторов: распределения частиц по скоростям, столкновительных процессов, релятивистских эффектов, вторичной эмиссии и т. д.

Отметим, что конечной целью моделирования ЭОС является не просто расчет полей при заданных геометрических и других характеристиках, а их оптимизация по заданному целевому функционалу при указываемых линейных и нелинейных ограничениях. Решение формулируемых таким образом обратных задач реализуется методами математического программирования на основе многократных расчетов прямых задач [7].

Краткое описание алгоритмов

Вычислительная схема при реализации рассматриваемых задач состоит из двух основных этапов: решение полевых задач и расчет траекторий, токов и плотностей заряженных частиц,

выполняемых поочередно в процессе моделирования нестационарных явлений и проведения нелинейных итераций.

Полевые задачи включают расчеты электростатических и магнитостатических полей, а также вычисление собственных гармоник и частот резонаторных конструкций. В многомерных случаях для их решения наиболее эффективными являются МКО и конечных элементов, основывающихся на построении адаптивных сеток, учитывающих особенности геометрии расчетной области и дифференциальных свойств искомым функций. Численное решение систем алгебраических уравнений с разреженными матрицами высокого порядка (до миллиона или десятков миллионов), получаемых в результате аппроксимации исходных дифференциальных краевых задач, является одним из наиболее трудоемких этапов, поскольку объем арифметических операций здесь растет нелинейно с увеличением количества узлов сетки.

Если h — характерный шаг сетки, то в трехмерном случае число узлов равно $N_g = c_g h^{-3}$

(здесь и далее буквой "с" с индексами обозначаются некоторые константы). Решение соответствующих систем сеточных линейных уравнений с помощью самых эффективных на сегодняшний день итерационных методов сопряженных градиентов с предобуславливанием требует проведения $N_i = c_i h^{-1/2} \ln h$ итераций. Если предположить, что для решения "большой" задачи необходимо рассчитать N_t временных шагов и на каждом из них выполнить N_n нелинейных итераций, да еще все это перемножить на количество оптимизационных вариантов N_0 , то общий объем арифметических действий на вычисления всех полей оценивается величиной

$$Q_f = c_g c_i h^{-3.5} \ln h N_t N_n N_0,$$

которая может оказаться астрономической (например при $h = 10^{-3}$) даже для современных суперкомпьютеров.

Другой ресурсоемкий вычислительный этап — это численное интегрирование уравнений движения частиц в электромагнитном поле с одновременным расчетом плотностей токов и зарядов. Требования к точности их вычисления обуславливают введение, по крайней мере, нескольких частиц в расчете на один сеточный узел, и это количество многократно увеличивается при учете распределения потоков по скоростям. Если число учитываемых скоростных групп частиц равно N_v , то общий объем соответствующих вычислений примерно равен

$$Q_p = c_p N_g N_v N_t N_0,$$

причем постоянная c_p может достигать нескольких сотен и тысяч.

Расчет траекторий заряженных частиц в известном электромагнитном поле представляет собой простую вычислительную процедуру (см. обзор разных физических ситуаций в [1]), которая для простейшего нерелятивистского случая формально представима в следующем виде:

$$\begin{aligned} \bar{r}^{n+1} &= f_r(\bar{r}^n, \tau_n, \bar{E}, \bar{B}, \bar{v}^n), \\ \bar{v}^{n+1} &= f_v(\bar{r}^n, \tau_n, \bar{E}, \bar{B}, \bar{v}^n), \end{aligned} \quad (1)$$

где n и τ_n — номер и величина временного шага, а функции включают вычисления электростатических и магнитных полей по значениям потенциалов в узлах сетки, что является достаточно трудоемкой операцией в случае нерегулярных трехмерных сеток.

Одновременно с расчетом траекторий частиц вычисляются распределения плотностей токов и объемных зарядов по узлам сетки.

Остановимся теперь на вопросах реализации краевых (полевых) задач для электромагнитных полей и ради простоты рассмотрим только алгоритмы решения системы сеточных семиточечных линейных алгебраических уравнений, аппроксимирующих на неравномерной параллелепипедаидальной сетке

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + h_i^x, \quad i = 1, \dots, I, \\ y_{j+1} &= y_j + h_j^y, \quad j = 1, \dots, J, \\ z_{k+1} &= z_k + h_k^z, \quad k = 1, \dots, K, \end{aligned}$$

одно дифференциальное уравнение для электростатического или магнитного потенциала:

$$\begin{aligned} (Au)_{i,j,k} &\equiv p_{i,j,k}^0 u_{i,j,k} - p_{i,j,k}^1 u_{i-1,j,k} - \\ &- p_{i,j,k}^2 u_{i,j-1,k} - p_{i,j,k}^3 u_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}^4 u_{i,j+1,k} - \\ &- p_{i,j,k}^5 u_{i,j,k-1} - p_{i,j,k}^6 u_{i,j,k+1} = f_{i,j,k}, \end{aligned} \quad (2)$$

где коэффициенты $p_{i,j,k}^{(l)}$ и правая часть $f = \{f_{i,j,k}\}$ вычисляются через шаги сетки с учетом краевых условий.

Одним из эффективных итерационных алгоритмов решения систем (2) является предобусловленный метод чебышевского ускорения

$$Bv^n = r^n \equiv f - Au^n, \quad u^{n+1} = u^n + \tau_n v^n,$$

где матрица B подбирается из условий простой обратимости и относительной малости числа обусловленности

$$\kappa(B^{-1}A) = \lambda_{\max}(B^{-1}A) / \lambda_{\min}(B^{-1}A), \quad (3)$$

в сравнении с $\kappa(A)$, а итерационные параметры τ_n вычисляются через участвующие в (3) максимальное и минимальное собственные числа [5].

Поскольку последние в практических задачах могут быть оценены только грубо, наиболее распространенными являются предобусловленные методы сопряженных градиентов, в которых оптимальные итерационные параметры находятся в процессе итераций:

$$\begin{aligned} r^0 &= \bar{f} - \bar{A}u^0, \quad p^0 = r^0, \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n p^n, \quad r^{n+1} = r^n - \alpha_n A p^n, \\ \alpha_n &= \frac{(r^n, r^n)}{(A p^n, p^n)}, \quad p^{n+1} = r^n + \beta_n p^n, \\ \beta_n &= \frac{(r^{n+1}, r^{n+1})}{(r^n, r^n)}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\bar{f} = B^{-1}f$, $\bar{A} = B^{-1}A$ определяют предварительно преобразованную систему $\bar{A}u = \bar{f}$.

Так как в трехмерных задачах матрица системы (2) представима в виде суммы $A = A_x + A_y + A_z$ простых трехдиагональных матриц, каждая из которых получается из аппроксимации вторых производных по одной из трех координат, то естественным является искать матрицу B в виде произведения трехдиагональных матриц множителей

$$B = B_x B_y B_z = (I + \omega A_x)(I + \omega A_y)(I + \omega A_z), \quad (5)$$

что порождает неявные методы переменных направлений, в которых “внутренние” итерационные параметры ω оптимизируются на основе спектральных свойств участвующих в (5) матриц.

Отметим, что обращение каждого из матричного множителей легко осуществляется с помощью методов прогонки, которые мы опишем на примере трехточечной системы

$$\begin{aligned} -a_i u_{i-1} + b_i u_i - c_i u_{i+1} &= g_i, \\ i = 1, \dots, I, \quad a_1 = c_I = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Искомое решение можно искать с помощью одной из двух рекуррентных последовательностей:

$$u_i = \begin{cases} \bar{\beta} u_{i+1} + \bar{z}_i, & i = I, I-1, \dots, 1, \\ \bar{\beta}_i u_{i-1} + \bar{z}_i, & i = 1, 2, \dots, I, \end{cases} \quad (7)$$

в которых вспомогательные величины определяются как

$$\begin{aligned} \bar{\beta}_i &= c_i \bar{d}_i, \quad \bar{d}_i = (b_i - a_i \bar{\beta}_{i-1})^{-1}, \\ \bar{z}_i &= (g_i + a_i \bar{z}_{i-1}) \bar{d}_i, \quad i = 1, \dots, I, \\ \bar{\beta}_i &= a_i \bar{d}_i, \quad \bar{d}_i = (b_i - c_i \bar{\beta}_{i+1})^{-1}, \\ \bar{z}_i &= (g_i + c_i \bar{z}_{i+1}) \bar{d}_i, \quad i = I, \dots, 1. \end{aligned} \quad (8)$$

Заметим, что при многократном решении систем вида (6) и запоминании промежуточных величин реализация формул (7), (8) требует выполнения трех умножений и двух сложений в расчете на один узел сетки.

Поскольку рекурсивные формулы прогонок (7) непосредственно не распараллеливаются, мы рассмотрим редукцию системы трехточечных уравнений (6) на p подсистем. Предположим, что все подсистемы будут иметь одинаковый порядок $N = \frac{l+1}{p} - 1$, причем в них не входят

$(p - 1)$ узлов-разделителей, для которых формируется своя (связующая) система уравнений. Нумеруя узлы-разделители через $q_l = (N + 1)j$, $l = 0, 1, \dots, p$ для каждой подсистемы вида (6) при $i = q_l + 1, q_l + 2, \dots, q_{l+1} - 1$ решение можно представить в виде суммы трех слагаемых

$$u_i^{(l)} = \varphi_i^{(l)} + v_i^{(l)} u_{q_{l-1}} + w_i^{(l)} u_{q_l}, \quad l = 1, 2, \dots, p, \quad (9)$$

где $\varphi_i^{(l)}$ — решение неоднородной подсистемы с однородными граничными условиями $u_{q_{l-1}} = u_{q_l} = 0$, а $v_i^{(l)}$ и $w_i^{(l)}$ — решение однородных подсистем ($f_i = 0$), но с разными неоднородными граничными условиями ($u_{q_{l+1}} = 1, u_{q_l} = 0$ и $u_{q_{l-1}} = 0, u_{q_l} = 1$, (10) соответственно).

При этом для неизвестных разделителей с помощью подстановки (10) в (6) получается редуцированная система с трехдиагональной матрицей

$$\begin{aligned} -a_{q_l} v_{q_{l-1}}^{(j)} u_{q_{l-1}} + (b_{q_l} - a_{q_l} w_{q_{l-1}}^{(j)} - c_{q_l} v_{q_{l+1}}^{(j+1)}) u_{q_l} - \\ - c_{q_l} w_{q_{l+1}}^{(j+1)} u_{q_{l+1}} = g_{q_l} + a_{q_l} \varphi_{q_{l-1}}^{(j)} + c_{q_l} \varphi_{q_{l+1}}^{(j+1)}, \quad (11) \\ l = 1, 2, \dots, p - 1. \end{aligned}$$

Таким образом, при многократном решении трехдиагональных систем с разными правыми частями алгоритм редукции состоит из следующих этапов:

для каждой l -й подсистемы с помощью формул прогонок (7), (8) вычисляются не зависящие от f_i значения $v_i^{(l)}, w_i^{(l)}$;

для конкретных значений f_i по формулам вида (7), (8) для разных l находятся величины $\varphi_i^{(l)}$ и правые части в (11), затем решается редуцированная система для u_{q_l} , а из соотношений (10) восстанавливается искомое решение.

Если $p \ll 1$, то решение редуцированных систем (11) можно проводить на одном из процессоров без распараллеливания, так как данный этап требует относительно малого объема

операций в общем вычислительном процессе. Рассмотренные алгоритмы применимы и для решения нелинейных задач магнитостатики. В этом случае коэффициенты уравнений (2) зависят от искомого решения, и на основе методов квазилинеаризации организуется двойной итерационный процесс с пересчетом коэффициентов на внешних итерациях. Данная процедура усложняет саму вычислительную проблему, но не ухудшает эффективность распараллеливания.

Принципы распараллеливания алгоритмов

Опишем сначала модель вычислений на многопроцессорном компьютере, в рамках которой будем конструировать параллельные алгоритмы и исследовать их эффективность. Время выполнения некоторой задачи на p -процессорной вычислительной системе определяем как

$$T_p = \tau_a N_a + (\tau_0 + \tau_c N_c) m_c, \quad (12)$$

где правое и второе слагаемые означают длительность исполнения арифметических операций и обменов, соответственно; τ_a и N_a — среднее время реализации одного арифметического действия и их общее количество (в простейшем случае учитываются только умножения); m_c — число информационных обменов между процессорами; τ_0 — время задержки (инициализации) одного обмена; τ_c и N_c — время передачи одного числа и их количество в одном обменном файле. Подчеркнем, что все операции рассматриваются над вещественными числами с двойной точностью.

В качестве критериев эффективности распараллеливания определяем коэффициент ускорения и коэффициент использования процессоров:

$$R_p = T_1/T_p, \quad E_p = R_p/p, \quad (13)$$

где T_1 и T_p — времена решения задачи (или реализации алгоритма) на одном или на p -процессорах.

Оптимизация алгоритмов распараллеливания заключается в максимизации коэффициентов (13), причем на ВС с однородной памятью очевидны ограничения $R_p \leq p, E_p \leq 1$ (в реальных компьютерах за счет, например, эффективного использования кэш-памяти можно достичь эффекта сверхлинейного ускорения, т. е. $R_p > p, E_p > 1$).

Следует иметь в виду, что различные алгоритмы решения одной и той же задачи распараллеливаются с разной эффективностью, так что зачастую для повышения коэффициентов R_p и E_p для многопроцессорной ВС приходится строить метод, который для $p = 1$ является заве-

домо проигрышным. Данный фактор приводит к занижению реальной эффективности.

Оптимизация распараллеливания алгоритмов в значительной степени обусловлена возможностью уменьшения коммуникационных потерь, т. е. величин m_c и N_c в (12), поскольку на практике $\tau_a \ll \tau_c \ll \tau_0$, причем отношения этих времен могут достигать тысячи и более.

Главным принципом распараллеливания полевых задач является декомпозиция областей: расчетная область Ω разбивается на подобласти $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_p$ таким образом, чтобы общая задача свелась к решению подзадач в соответствующих подобластях, которые решались бы одновременно — каждая на “своем” процессоре. Поскольку все подзадачи являются взаимосвязанными, то между подобластями периодически необходимо проводить информационные обмены, что традиционно приводит к организации итераций по подобластям. Если, в свою очередь, каждая подзадача в подобласти решается итерационным методом, то в итоге приходим к двойному итерационному процессу, что, как правило, чревато увеличением вычислительной сложности алгоритма.

Рассмотренный неявный трехмерный метод переменных направлений (НМПН-3) обладает тем замечательным свойством, что его распараллеливание на принципе декомпозиции областей оказывается возможным без привлечения дополнительных внешних итераций. Таким образом, его однопроцессорный и многопроцессорный варианты требуют одинакового числа итераций $n(\epsilon)$ для достижения требуемой точности ϵ .

Расчетную сеточную область $\Omega^h = \{x_i, y_j, z_k\}$ разбиваем на следующие подобласти-полосы:

$$\Omega_l = \{q_l < i < q_{l+1}, 1 \leq j \leq J, 1 \leq k \leq K\}, \\ l = 1, \dots, p,$$

т. е. разделительные узлы лежат в плоскостях $x = x_{q_l}$.

При распараллеливании алгоритмов (4)—(10) естественно поступать следующим образом. При обращении матриц B_y, B_z , т. е. решении аналогичных (6) трехдиагональных систем, применяем обычные формулы прогонки по y, z , так как они полностью реализуются в “своих” процессорах. Для обращения же B_x используется метод редукции (9), (10).

Рассмотрим теперь эффективность распараллеливания одной итерации процесса (4), (5) в предположении, что все необходимые коэффициенты β_j, β_i и другие для прогонок всех направлений рассчитаны до итераций и хранятся в памяти соответствующих процессоров.

Время реализации одной итерации на одном процессоре равно (учитываются только умноже-

ния: 7 — на операцию $y = Ap$, 9 — на проведение прогонок (без алгоритма редукции) по трем направлениям в матричной операции $B^{-1}y$ и 5 — на реализацию формул сопряженных градиентов)

$$T_1 \cong 21 IJK\tau_a.$$

Эти же вычисления на p -процессорах, в пренебрежении затрат на решение редуцированной системы (10), оцениваются величиной

$$T_p \approx T_1/p + 2(\tau_0 + JK\tau_c).$$

Коммуникационные потери T^c здесь учитывают обмены каждого процессора с двумя его соседями числовыми массивами объемом JK . Таким образом, коэффициент ускорения оказывается равным

$$R_p \approx \left(1 + \frac{2(\tau_0 + JK\tau_c)p}{21 IJK\tau_a}\right)^{-1},$$

т. е. эффективность распараллеливания становится линейной (максимальной) при $I/p \rightarrow \infty (E_p \rightarrow 1)$.

Перейдем теперь к анализу распараллеливания самосогласованных задач, связанных с многократными расчетами как полевых, так и многочастичных задач. Главные трудности здесь связаны с перелетом частицы из одной подобласти в другую. Поскольку поля для разных сеточных подобластей находятся в разных процессорах, то при этом необходимо делать информационные обмены и соответствующим образом организовывать логику расчетов.

Для оценки эффективности многопроцессорных расчетов достаточно рассмотреть одну “нелинейную” итерацию по объемному заряду. С точки зрения минимизации коммуникационных потерь и организации вычислительного процесса можно рассмотреть два крайних случая исходной постановки проблемы:

количество рассчитываемых больше (или много больше) числа узлов сетки;

число частиц меньше количества узлов, например, пучок занимает только малую часть расчетной области.

На одном процессоре время расчета траекторий частиц, распределения зарядов и токов для одной “нелинейной” итерации можно оценить величиной

$$T_1^q = c_q N_q N_t \tau_a, \quad (14)$$

где N_q — общее число расчетных частиц;
 N_t — среднее количество временных шагов при движении одной частицы в области;

c_q — некоторая константа, определяемая алгоритмом реализации формул (1), значение которой можно принять около 100.

Здесь следует различить два типа задач: расчет нестационарных процессов, когда пересчет электромагнитных полей делается на каждом временном шаге (в этом случае $N_t = 1$), и нахождение установившихся (стационарных) режимов, когда фактически используется модель трубок тока [1] и N_t можно считать примерно равным среднему числу узлов в одном измерении.

При использовании p процессоров сделаем идеализированное предположение, что текущее (исходное) распределение частиц — равномерное по подобластям, а их параметры (координаты и скорости) одинаковыми объемами расположены в памяти соответствующих процессоров. Тогда вместо (14) получаем

$$T_p^q = T_1^q / p + (6\tau_c + \tau_0) N_q N_t \theta, \quad (15)$$

где $0 < \theta < 1$ — некоторая усредненная доля тех частиц, которые за рассматриваемый период перелетают из одной подобласти в другую. Здесь предусмотрен в некотором смысле наихудший вариант организации обменов: как только каждая рассчитываемая частица пересекает границу подобластей, значения ее фазовых координат пересылаются в соответствующий процессор. Уменьшить количество обменов можно путем накопления некоторого количества вылетевших из подобласти частиц и организации межпроцессорных пересылок “пакетов” таких частиц, что сократит в (15) коммуникационные потери за счет уменьшения коэффициента перед τ_0 .

Естественно, что имеющиеся здесь трудности снимаются, когда число частиц мало и расчеты траекторий занимают малую долю в общем объеме вычислений.

Если число частиц намного больше количества узлов, то возможна другая стратегия обменов: после расчета полей по подобластям в каждом процессоре формируется “полное” поле для всей расчетной области, после чего “потокосая часть” самосогласованной задачи распараллеливается идеально без анализа перелетов частиц из одной подобласти в другую и без пересылок параметров частиц. Эффективность такого подхода сильно зависит от архитектуры ВС: она высока для систем с общей памятью, а при распределенной по процессорам оперативной памятью коммуникационные потери определяются схемой физических межпроцессорных соединений.

Идеальное развитие такой идеи заключается в следующем. Декомпозиция подвергается не расчетная сеточная область, а “облако” зарядов по его положению на текущий момент времени с примерно равным количеством частиц в каждом “подоблаке”. При этом в соответствующем про-

цессоре будет динамически формироваться сеточная “полевая” подобласть, необходимая для расчета траекторий.

Рассмотренные выше варианты коммуникаций демонстрируют отнюдь не оптимальное решение, а сложности проблемы распараллеливания самосогласованных задач ЭОС. Здесь по существу требуется отображение алгоритмов на архитектуру вычислительной системы, и результаты могут иметь “штучный” характер в зависимости от априорного физического анализа характера потоков частиц. В данной области, несомненно, еще требуется большой объем исследовательских вычислительных экспериментов.

Необходимо также заметить, что если распараллеливание алгоритмов реализуется в рамках производственного или коммерческого, программного обеспечения, то здесь возникают многочисленные проблемы, связанные с созданием компонент современных вычислительно-информационных технологий: интерактивный графический пользовательский интерес, генераторы адаптивных нерегулярных сеток для сложных расчетных областей, автоматизация вычислительного процесса для логически сложных задач, обработка и визуализация результатов расчета. Следует отметить, что соответствующие инструментальные средства несут главным образом информационную нагрузку, а главные объемы вычислений занимают именно алгоритмы расчета полевых и потоковых задач.

Работа поддержана грантом РФФИ
№ 02-01-01176 и программами РАН п. 1, 3, 5.

Литература

1. Ильин В. П. Численные методы решения задач электрофизики. — М.: Наука, 1985.
2. Вишков В. А., Вишков К. В., Дудникова Г. И. Алгоритмы решения задачи взаимодействия лазерного импульса с плазмой // Вычислительные технологии. 2001. Т. 6. № 2. С. 47—63.
3. Воеводин В. В., Воеводин Вл. В. Параллельные вычисления. — С.-Петербург: Изд. БХВ-Петербург, 2002.
4. Ильин В. П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. — Новосибирск: Изд. ИМ СО РАН, 2000.
5. Ильин В. П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. — М.: Наука, 1995.
6. Ильин В. П. Параллельные неявные методы переменных направлений // ЖВМиМФ, 1997. Т. 37. № 8. С. 899—907.
7. Ильин В. П., Катешов В. А., Куликов Ю. В., Монастырский М. А. Численные методы оптимизации эмиссионных электронно-оптических систем. — Новосибирск: Наука, 1987.

Parallel algorithms of modeling the high current EOS

V. P. Il'in

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS, Novosibirsk, Russia

The algorithms of parallelizing the computations are considered for simulation of electro-physical processes in high current electrooptical devices, described by Maxwell-Vlasov system of differential equations. The methods for solving the field and flow tasks are presented briefly for computations of selfconsistent nonlinear problems. The criteria of parallelization efficiency are analyzed for implicit alternating direction method with acceleration by conjugate gradient approach and particle- in- the- cell method for 3-D case. The estimates of communication costs are carried out for various variants of domain decomposition and for different architectures of multiprocessor computational systems.