

В. В. Аристов, д-р физ.-мат. наук, проф., гл. науч. сотр., e-mail: aristovvl@yandex.ru,
Вычислительный центр им. Дородницына ФИЦ "Информатика и управление" РАН,
МИРЭА — Российский технологический университет,
А. Д. Ястребов, аспирант. e-mail: andryast711@gmail.com,
А. В. Строганов, канд. физ.-мат. наук, e-mail: savthe@gmail.com,
МИРЭА — Российский технологический университет

Развитие параллельного детерминистического метода решения уравнения Больцмана и его реализация с помощью OpenCL

Предлагается оптимизация алгоритма для детерминистического метода решения кинетического уравнения Больцмана с использованием параллельных вычислений. Приводятся примеры применения метода для задач изучения динамики распределения средств и активов в экономических проблемах. Проводится сравнение использования ресурсов компьютера для приведенных алгоритмов и алгоритмов, описанных в более ранних работах. Показаны преимущества усовершенствованных алгоритмов.

Ключевые слова: уравнение Больцмана, детерминистический метод, эконофизика, параллельные вычисления, OpenCL

Введение

Интегриродифференциальное уравнение Больцмана описывает динамику статистического распределения частиц в газе [1]. С помощью некоторых его обобщений можно моделировать неравновесные течения в более сложных средах. Уравнение Больцмана является основным уравнением физической кинетики. Оно имеет достаточно широкое применение не только при изучении динамики разреженного газа, но используется и в других областях механики и иных наук. Уравнение Больцмана применимо для идеального разреженного газа, для которого усредненной по времени потенциальной энергией взаимодействия молекул можно пренебречь по сравнению с их кинетической энергией. Кинетическая теория применяется в задачах аэродинамики обтекания объектов на больших высотах, задачах о течениях на микромасштабах, например, в совре-

менных вакуумных приборах и микроэлектромеханических системах, а также в других приложениях.

В последние годы получила развитие эконофизика — наука, применяющая методологию физики для анализа экономических данных. В ней находят применение различные методы описания динамических систем, в том числе уравнение Больцмана и другие кинетические уравнения. Появилось достаточно много исследований по этой тематике, опубликован ряд важных статей, издано несколько монографий, см., например, работы [2—7]. Получены интересные результаты, в которых моделируются различные процессы в экономике. Вместе с тем, неравновесные процессы требуют привлечения более сложного кинетического аппарата.

В настоящей работе предлагается использовать уравнение Больцмана в простой физической ситуации — пространственно одномерной изотропной релаксации, но для ряда

экономических задач этого оказывается достаточно. При этом по сравнению с указанными исследованиями, где в основном исследуются стационарные распределения, будет изучаться динамика неравновесных распределений средств в зависимости от числа населения и характер перехода к равновесным стационарным состояниям. Рассматривается динамика перехода от неравновесных распределений к равновесному. Изучаются две задачи. В первой задаче моделируется процесс экономического перераспределения средств (активов), связанный с ваучеризацией в России в 90-е годы, когда фактически происходил переход от начального существенно неравновесного состояния к стационарному равновесному. Во второй задаче задается стационарная неравновесная ситуация: распределение доходов населения в Аргентине в 2002 г. Изучается, какова была бы картина перехода к равновесию, если был бы включен механизм простого рынка обменов.

Основная цель исследований в настоящей работе состоит в развитии детерминистического метода решения уравнения Больцмана с параллельными вычислениями на видеокартах. Детерминистические методы привлекательны своей простотой, но требуют усовершенствования, поскольку матрица коэффициентов квадратичной формы, аппроксимирующей интеграл столкновений, достаточно большая. Для развития и улучшения таких методов есть несколько путей, которые используют отечественные и зарубежные исследователи. Один из них — разработка новых алгоритмов параллельных вычислений, поскольку детерминистический подход предоставляет для этого различные возможности. Второй способ — изучение свойств данной матрицы и сокращение необходимого числа элементов в ней. Безусловно, допустимо и желательно сочетание указанных возможностей. Ранее предложенный в работах [8, 9] метод был в модифицированном виде применен в статье [10] для случая пространственно-однородной изотропной релаксации.

В работе [11] детерминистический метод был усовершенствован с использованием свойств разреженности данной матрицы коэффициентов и различных свойств ее симметрии. Здесь применялись впервые в данном методе и параллельные алгоритмы. Также в этих работах был впервые использован галеркинский подход. В дальнейшем такой подход был применен в статье [12], где изучались дальнейшие усовершенствования алгоритма с использованием различных свойств данной матрицы ко-

эффициентов. В работах [13, 14] параллельные вычисления с помощью видеокарт для детерминистического метода решения уравнения Больцмана сравнивались с популярным подходом DSMC метода статистического моделирования. Оказалось, что во всяком случае для релаксационных задач указанный параллельный алгоритм имеет преимущества по быстродействию. Все это говорит о вычислительной перспективности развиваемого в настоящей работе подхода.

1. Описание задачи и метода решения

Для построения модели простого рынка вначале запишем классическое уравнение Больцмана для пространственно-однородного случая:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = I(f, f),$$

где $f(t, \xi)$ — функция распределения; t — время; $\xi \in \mathbb{R}_\xi^3$ — скорость молекулы; $I(f, f)$ — интеграл столкновений, который определяет скорость изменения функции плотности распределения частиц вследствие столкновений между ними, он может быть записан в разных формах, например, так:

$$I(f, f) = \int_{\mathbb{R}_\xi^3} \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{n} < 0} B(\mathbf{g}, \mathbf{n}) [f'f'_1 - ff_1] d\mathbf{n} d\xi_1,$$

где $f = f(\xi)$, $f_1 = f(\xi_1)$, $f' = f(\xi')$, $f'_1 = f(\xi'_1)$, \mathbf{n} — единичный вектор, соединяющий центры частиц при столкновении и направленный от частицы со скоростью ξ к частице со скоростью ξ_1 , $\mathbf{g} = \xi - \xi_1$ — относительная скорость двух частиц; $\xi' = \xi + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$, $\xi'_1 = \xi_1 - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$. $B(\mathbf{g}, \mathbf{n})$ — ядро столкновений, которое для упрощения используется в виде $B(\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}) = a^2 c_s \left(\frac{|\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}|}{c_s} \right)^\theta$, где a — радиус частиц; c_s — характеристическая средняя скорость частиц, $\theta \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. $\theta = 1$ используется для модели твердых сфер, а $\theta = 0$ — для постоянного ядра столкновений. Такое ядро используется в экономфизике, так как в экономфизических моделях аналогом обмена энергией при столкновении частиц является обмен агентами между собой некоторым количеством денег или товаров, не зависящий от "относительной скорости" \mathbf{g} (вопрос о значении этого параметра в контексте экономфизики выходит за рамки данной работы).

Интеграл столкновений для постоянного сечения столкновений частиц может быть раз-

делен на интеграл прямых и интеграл обратных столкновений. При этом можно перейти от рассмотрения скоростей частиц к рассмотрению энергий частиц, как это было сделано в работе [9]. На i -м шаге по времени имеем:

$$I_i = N_i - v_i f_i.$$

Таким образом, задача сводится к вычислению интеграла обратных столкновений N_i и интеграла прямых столкновений v_i . I_i — интеграл столкновений в момент времени i , для которого в точности выполняются законы сохранения энергии при столкновениях частиц и в целом, с учетом разбиения на M ячеек. Значения для N_i и v_i вычисляются по следующим формулам:

$$N_i = F \Delta E^{3/2} \sum_{j=1}^M \left(j - \frac{1}{2} \right)^{1/2} \Psi_{ij}, \quad (1)$$

$$\Psi_{ij} = \sum_{\lambda=1}^{M_{ij}} f_{k(\lambda)} f_{l(\lambda)} \widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)},$$

$$v_i = F \Delta E^{3/2} \sum_{j=1}^M \left(j - \frac{1}{2} \right)^{1/2} f_j A_{ij}, \quad A_{ij} = \sum_{\lambda=1}^{M_{ij}} \widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}, \quad (2)$$

где $F = 2^{3/2} \pi^2 a^2 c_s$, $\Delta E = E_{i+1} - E_i$ — ширина шага в пространстве энергий. $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ — трехмерная структура, хранящая безразмерные значения, зависящие только от максимальной энергии, числа ячеек энергии и выбранного ядра столкновений. Без учета закона сохранения энергии $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ является четырехмерной, но, в силу закона сохранения энергии, $i + j = k + l$, т. е. для фиксированных i и j можно записать:

$$l(\lambda) = i + j - k(\lambda), \quad \lambda = \overline{1, M_{ij}},$$

где M_{ij} — число ячеек энергии, куда может перейти частица с энергией E_i при столкновении с частицей с энергией E_j . Например, при столкновении двух частиц с минимальной энергией ($i = 1, j = 1$) могут появиться только две аналогичные частицы $\{k(1) = 1, l(1) = 1\}$ и $M_{(1)(1)} = 1$. Однако, при столкновении двух частиц с суммарной энергией $M + 1$ существует M вариантов пар (от $\{k(1) = 1, l(1) = M\}$ до $\{k(1) = M, l(1) = 1\}$), и $M_{(\alpha)(M+1-\alpha)} = M, \alpha = \overline{1, M}$. Значения $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ получаются из значений Ω_{ij}^{kl} с помощью DVM-коррекции, необходимой для выполнения закона сохранения энергии [10]. При $\theta = 0$

$$B_{ij}^{kl} = \int_{\Omega_{ij}^{kl}} dx dy,$$

где x, y — косинусы углов между скоростями двух сталкивающихся частиц и вектором, соединяющим их центры, а Ω_{ij}^{kl} — множество возможных пар (x, y) , в большинстве случаев отличное от $[-1; 1] \times [-1; 1]$, так как не при всех углах столкновения двух частиц, имеющих энергии E_i и E_j , возможны энергии E_k и E_l после столкновения при зафиксированных i, j, k, l .

Значения структуры $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ и, следовательно, значения A_{ij} зависят только от максимальной энергии, числа ячеек энергии и выбранного ядра столкновений, поэтому могут быть вычислены заранее и не влияют на вычислительную сложность алгоритма.

2. Параллельный алгоритм

Будем вычислять (i, j) -ю компоненту интеграла столкновений в j -м потоке на i -м вычислительном ядре. Суммирование по j в формулах (1), (2) выполняется параллельно с помощью алгоритма *sum reduction*, в итоге вычисляется i -я компонента.

Для применения данной модификации алгоритма на системе с видеокартой необходимо, чтобы видеокарта имела достаточный объем оперативной памяти для хранения всех значений структуры $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ (занимающих большую часть памяти компьютера), всех значений A_{ij} , всех текущих значений f_i , а также для сохранения всех новых значений f_i . Так, например, для вычисления интеграла столкновений при $M = 512$ необходимо, чтобы видеокарта имела по крайней мере 6 Гбайт оперативной памяти.

При использовании M ядер видеокарты с M потоками на каждом ядре, где каждому i соответствует одно ядро, а каждому j соответствует один поток, имеем следующий алгоритм:

1. Вычисление Ψ_{ij} по формуле (1) каждым потоком в отдельности.
2. Вычисление выражений под знаком суммы для N_i и v_i .
3. Получение значений N_i и v_i с помощью метода сокращения суммы. Полученные значения хранятся в памяти первого потока для каждого ядра видеокарты.
4. Решение дифференциального уравнения на каждом ядре для получения значения f_i на следующем шаге по времени.

Эти действия повторяются для каждого шага по времени. Для хранения $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ в памяти видеокарты необходимо перейти к одномерному массиву \widehat{B}^* , причем таким образом,

чтобы для каждого $k(\lambda)$ "соседние" потоки обрабатывались к соседним элементам $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ массива \widehat{B} . Для этого элементы должны располагаться в памяти таким образом, чтобы индекс элемента $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ в одномерном массиве \widehat{B} был равен $iM^2 + kM + j$, где $i, j, k \in [0, M)$. Такое расположение элементов в памяти видеокарты позволяет всем потокам считывать каждый (i, j, k) -й элемент (при фиксированных i и j) одновременно, что на практике дает ощутимое ускорение работы программы за счет многократного уменьшения времени чтения данных из памяти.

Из выражений (1), (2) видно, что для каждой пары (i, j) сложность вычисления ψ_{ij} составляет $O(M)$. Также видно, что для каждого i сложность равна $O(M^2)$. Так как $i = \overline{1, M}$, то в итоге сложность алгоритма для одного шага по времени равна $O(M^3)$. Для алгоритма в целом с учетом числа шагов по времени T сложность оценивается как $O(TM^3)$.

Сложность параллельного алгоритма остается, очевидно, такой же, однако распараллеливание позволяет сократить требуемое время вычислений фактически в M раз при наличии подходящего устройства. Таким образом, можно считать, что для параллельного алгоритма сложность стремится к $O(TM^2)$.

3. Оптимизация объема используемой памяти

В работе [10] предлагается программа NOMISBOLTZ для MATLAB/Octave, являющаяся простым и компактным примером реализации описанного выше метода решения однородного изотропного уравнения Больцмана. Так как задачи оптимизации этой программы не ставилось, существуют разные варианты ее улучшения.

Оптимизация объема используемой памяти возможна за счет сокращения количества вспомогательных данных, а также благодаря DVM-коррекции и возникающей вследствие коррекции симметричности матрицы $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$.

Для хранения значений матрицы $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ в программе NOMISBOLTZ используется двумерный массив структур, в которых кроме необходимых значений находятся вспомогательные значения, помогающие определять при вычислениях минимальное и максимальное значения индекса k для пары (i, j) , число индексов k , аналогичные значения для l . Эти вспомогательные значения увеличивают объем

требуемой памяти, так как к каждому из значений с плавающей точкой $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$, занимающих 8 байт каждое, прибавляются целочисленные значения $k(\lambda)$, $l(\lambda)$, $nEkm(\lambda) = k(\lambda) - 1$, $nEkp(\lambda) = k(\lambda)$, занимающие по 4 байта каждое. Таким образом, объем необходимой памяти увеличивается с 8 до 24 байт для каждого элемента $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$, т. е. в 3 раза. Также необходима память под число индексов k, l для каждой пары (i, j) , но их число сравнимо с $O(M^2)$, в то время как число элементов $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ сравнимо с $O(M^3)$, поэтому числом индексов можно пренебречь. В оригинальном методе [8, 9] используются значения B_{ij}^{kl} , которые хранятся в трехмерной матрице с M^3 значениями, часть из которых является нулевыми. Переход к энергиям увеличивает число нулевых элементов и упрощает понимание, какие именно элементы являются нулевыми:

$$B_{ij}^{kl} = 0 \Leftrightarrow \nexists l : i + j = k + l; i, j, k, l \in [1, M].$$

На рис. 1 (см. вторую сторону обложки) выделенные элементы — нулевые. Также нулевыми являются элементы, симметричные относительно центра структуры, так как аналогично двум частицам с низкими энергиями, которые не могут получить высокую энергию, две частицы с высокими энергиями не могут получить низкую энергию. Можно найти точное число ненулевых значений в $\widehat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$. Для зафиксированного i число элементов равно

$$M \frac{1+M}{2} + (i-1)(M-i).$$

Таким образом, число всех элементов в массиве равно

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^M \left(M \frac{1+M}{2} + (i-1)(M-i) \right) &= \\ &= M^2 \frac{1+M}{2} + \frac{M}{6} (M^2 - 3M + 2). \end{aligned}$$

В пределе отношение этого числа к M^3 равно

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{M^2 \frac{1+M}{2} + \frac{M}{6} (M^2 - 3M + 2)}{M^3} = \frac{2}{3}.$$

В итоге, вычисляя все вспомогательные значения, можно сократить объем используемой памяти по сравнению с оригинальным методом [8, 9] в 1,5 раза.

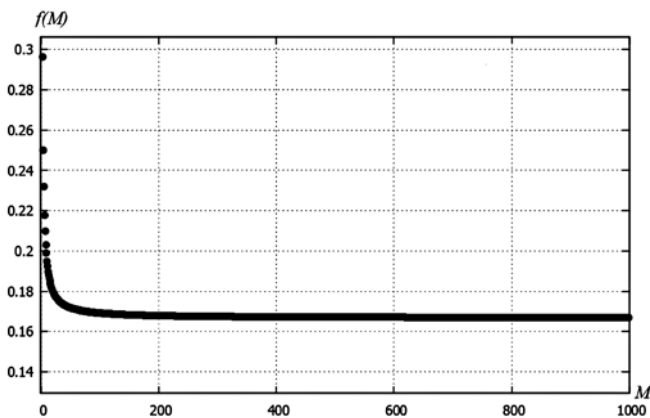


Рис. 3. Отношение числа уникальных элементов $\hat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ в модифицированном методе к этому же числу в оригинальном методе

Благодаря симметрии в матрице $\hat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ можно дополнительно сократить требуемый объем памяти. Если обозначить индексы каждого элемента как (i, j, k) ; $i, j = \overline{1, M}, k = \overline{1, M_{ij}}$, то значения четырех элементов (i, j, k) , (j, i, k) , $(i, j, M_{ij} - k)$, $(j, i, M_{ij} - k)$ равны (рис. 2, см. вторую сторону обложки).

Всего при подобном сокращении число элементов будет составлять

$$\sum_{i \geq j} \left\lfloor \frac{M_{ij}}{2} \right\rfloor, M_{ij} = \begin{cases} i + j - 1, & i + j - 1 \leq M; \\ 2M - i - j + 1, & i + j - 1 > M. \end{cases}$$

График отношения этого числа к M^3 представлен на рис. 3.

На графике видно, что это отношение стремится к $1/6$. Таким образом объем используемой памяти сокращается в 6 раз по сравнению с оригинальным методом.

4. Пример работы алгоритма для задач эконофизики

Обычно алгоритм применяется для решения задачи релаксации газа с возможностью получения промежуточных состояний между начальным и равновесным. Использование ядра столкновений из работы [10] с $\theta = 0$ позволяет применить алгоритм к моделям рынков [2–7], основанным на кинетической аналогии. Такие модели подразумевают соответствие частицам агентов на рынке, энергиям частиц — денежным средствам, активов каждого из агентов, взаимодействиям двух частиц — обменам между двумя агентами.

Для описания числа людей, обладающих определенными доходами (активами), приме-

няют распределение доходов $P(x)$, где $P(x)dx$ есть вероятность того, что в стационарном состоянии случайно выбранная персона могла бы иметь доход между x и $x + dx$. Описанный в работах [8–11] метод решения уравнения Больцмана имеет два важных отличия от методов, использованных в работах [2–7]. Первое — данный метод является детерминистическим, а не стохастическим. Второе — он позволяет получить значения функции распределения в моменты времени между начальным и равновесным распределениями. На рис. 4 показаны графики начального, конечного и нескольких промежуточных состояний функции распределения при моделировании так называемой ваучеризации в России в 90-е годы (такой процесс происходил и в некоторых других странах). Начальное распределение подразумевает $15 \cdot 10^7$ агентов, у каждого из которых есть 1 ваучер. Так что начальное распределение близко к "дельта-функции". Для описания данного рыночного процесса используется кинетическая аналогия взаимодействия частиц.

Таким образом, 150 000 000 ваучеров, каждый из которых соответствует доле в национальном богатстве, были равномерно распределены среди населения. Их можно было обменять на акции приватизируемых предприятий. Большинство людей быстро продали свои ваучеры за деньги. Большинство ваучеров в итоге приобреталось руководством предприятий. Мы можем оценить динамику этого кинетического процесса по официальным данным: известно, что каждый месяц проводилось 800 аукционов, т. е. 25 аукционов в день. Реальное число на сумму $\sim 10\,000$ ваучеров на 1 аукцион. Итак, 250 000 ваучер/день. Таким образом, в течение 1...3 лет все ваучеры ($1,5 \cdot 10^8$) находились на

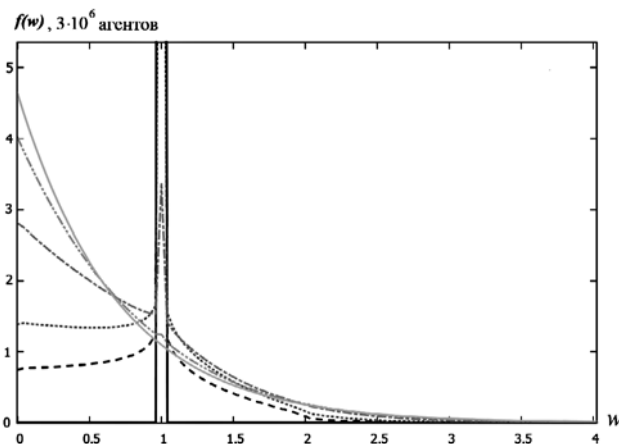


Рис. 4. Моделирование процесса ваучеризации

рынке или, в кинетических терминах, участвовали во взаимодействиях.

В течение этого периода времени процесс "релаксации" был завершен (в наших вычислениях мы использовали специальное масштабирование). Эффективная температура системы — соответствует "среднему богатству" и равна единице (соответствует 1 ваучеру, распределенному между всеми членами общества). Известно, что после завершения процесса большая часть населения не имела ваучеров, и расчеты подтвердили этот факт. На рис. 5 видно, что уже через 500 дней функция распределения близка к равновесной, причем большая часть агентов имеет очень мало ваучеров.

На рис. 5 показано стационарное распределение доходов населения для Аргентины 2002 г., которое принимается в качестве начального условия в задаче о релаксации (распределение взято из работы [2], стр. 159—167). Отметим, что, как указывается в работе [5], распределение доходов населения и распределение богатства тесно связаны (в частности, они могут зависеть линейно).

Неравновесное начальное распределение может быть сопоставлено с предполагаемым кризисным состоянием экономики (или во всяком случае, с экономикой, где существенны не только рыночные факторы). Процесс релаксации, основанный на уравнении Больцмана, показывает, как это кризисное распределение может быть переведено в равновесное распределение при введении рыночного механизма. В принципе, можно оценить и период такого гипотетического перехода.

В данной простой модели мы получили распределение Больцмана—Гиббса, фактически экспоненциальное (больцмановское) распределение ваучеров. Это следствие того, что в нашей модели ваучерная приватизация рас-

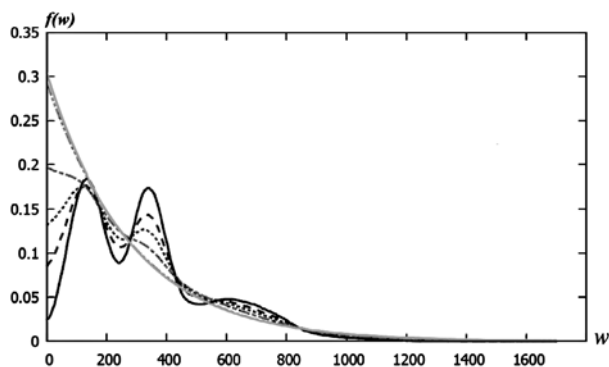


Рис. 5. Моделирование возможного влияния простого рынка на распределение доходов в Аргентине

сматривается как примитивный процесс обмена без какого-нибудь сбережения (экономии) средств. Можно рассмотреть более сложную модель рынка с фиксированными множителями сохранения. При включении коэффициента сбережения распределение сдвигается от экспоненциального к распределению, соответствующему гамма-функции.

Начальное распределение из примера для Аргентины похоже на равновесное с коэффициентом сбережения, но с аномалиями: два пика вместо одного (и третий небольшой максимум) и ненулевое число агентов с нулевым числом активов. Для моделей с коэффициентом сбережения число агентов без активов стремится к нулю [2].

5. Сравнение объема используемых ресурсов

Значения для четырех вариантов программы: на процессоре/видеокарте и с оптимизацией памяти/без оптимизации совпадают. Различие только в используемых ресурсах. Программа была запущена во всех четырех конфигурациях для 128 ячеек энергии, для 256 ячеек и 512 ячеек энергии для 10 000 шагов по времени. В качестве однопоточного процессора был использован CPU Intel Core i5 8600K @ 4.68GHz. В качестве видеокарты был использован GPU Nvidia GeForce 1080Ti. Программа для видеокарты написана с использованием OpenCL. В табл. 1 приведены примерные объемы памяти, необходимые для работы программы с оптимизацией памяти и без нее.

Время работы программы на имеющемся оборудовании приведено в табл. 2. Возможны четыре конфигурации, обозначенные в таблице следующим образом:

CPU/— — однопоточный алгоритм без оптимизации объема используемой памяти;

GPU/— — параллельный алгоритм без оптимизации объема используемой памяти;

CPU/+ — однопоточный алгоритм с оптимизацией объема используемой памяти;

Таблица 1

Примерные объемы необходимой памяти, Мбайт

Число ячеек	Без оптимизации	С оптимизацией
128	16	2,7
256	128	21,3
512	1000	170,7

Таблица 2

Время работы в разных конфигурациях, с

Число ячеек	CPU/-	GPU/-	CPU/+	GPU/+
128	13,38	0,096	43,506	0,088
256	95,277	0,531	340,26	1,84
512	705,18	3,01	2704,23	19,62

Таблица 3

Ускорение работы программы в разных конфигурациях

Число ячеек	$\frac{CPU/-}{GPU/-}$	$\frac{CPU/+}{GPU/+}$	$\frac{CPU/+}{CPU/-}$	$\frac{GPU/+}{GPU/-}$
128	139,375	494,39	3,25	0,917
256	179,43	184,92	3,57	3,47
512	234,28	137,83	3,83	6,51

GPU/+ — параллельный алгоритм с оптимизацией объема используемой памяти.

Можно определить, во сколько раз изменилась скорость работы алгоритма на имеющемся оборудовании.

Из табл. 3 видно, что для метода без оптимизации объема используемой памяти ускорение от распараллеливания увеличивается, но для метода с оптимизацией памяти ускорение уменьшается. Это связано с тем, что без оптимизации элементы $\hat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$, считываемые соседними потоками видеокарты, находятся в соседних элементах памяти, что благодаря особенностям работы OpenCL позволяет этим потокам не ждать, пока другие считают из памяти нужные им элементы, а считывать их одновременно. С оптимизацией эта особенность частично утрачивается из-за невозможности эффективно использовать объединение памяти (memory coalescing), вследствие чего возникают большие задержки при обращении к элементам из несмежных участков памяти. Видно, что на вариант с оптимизацией объема используемой памяти уходит больше времени, чем на вариант без оптимизации. Это связано

Таблица 4

Ускорение работы программы в разных конфигурациях

Число ячеек	$\frac{CPU/-}{GPU/+}$
128	152,045
256	51,78
512	35,942

с тем, что с оптимизацией для получения нужного элемента $\hat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ требуются дополнительные вычисления, чтобы найти место этого элемента в памяти. Без оптимизации дополнительные вычисления не нужны, так как каждый следующий элемент лежит в следующей ячейке памяти.

Несмотря на меньшее ускорение при переходе к параллельному алгоритму и замедление при оптимизации объема используемой памяти, алгоритм со всеми модификациями все равно оказывается значительно быстрее алгоритма, предложенного в работе [10], при этом используя почти в 6 раз меньше памяти (табл. 4).

Таким образом, предложенный алгоритм может использоваться для более быстрых вычислений с меньшей погрешностью, благодаря более частому делению пространства энергий на ячейки.

Заключение

Предложенные алгоритмы для решения уравнения Больцмана детерминистическим методом позволяют при наличии подходящего оборудования ускорить вычисления по крайней мере на два порядка, либо на порядок, но с уменьшением количества требуемой памяти до шести раз.

Также сделаны первые шаги для применения детерминистического метода решения уравнения Больцмана в однородном изотропном случае к задачам моделирования рынков аналогично методам эконофизики. Важным отличием описанного метода является возможность задать неравновесное распределение и проследить эволюцию идеального рынка к равновесному состоянию в различные моменты времени.

Список литературы

1. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
2. Chatterjee A., Yarlagadda S., Chakrabarti B. K. Econophysics of Wealth Distributions. Springer Verlag, Milan, 2005. 248 с.
3. Chakrabarti K., Chakraborti A., Chakravarty S. R., Chatterjee A. Econophysics of Income and Wealth Distributions. Cambridge University Press, Cambridge, 2013. 222 с.
4. Dragulescu A. A., Yakovenko V. M. Exponential and power-law probability distributions of wealth and income in the United Kingdom and the United States // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2001. Vol.299. P. 213–221.
5. Dragulescu A., Yakovenko V. M. Statistical mechanics of money // Eur. Phys. J. B. 2000. Vol. 17, Iss. 4. P. 723–729.

6. **Angle J.** Deriving the size distribution of personal wealth from "the rich get richer, the poor get poorer" // *Journal of Mathematical Sociology*. 1993. Vol. 18. P. 27–46.

7. **Cordier S., Pareschi L., Toscani G.** On a Kinetic Model for a Simple Market Economy // *Journal of Statistical Physics*. 2005. Vol. 120. P. 253–277.

8. **Аристов В. В.** О решении уравнения Больцмана для дискретных скоростей // *Докл АН СССР*. 1985. Т. 283, № 4. С. 831–834.

9. **Aristov V. V.** Direct methods for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2001.

10. **Asinari P.** Nonlinear Boltzmann equation for the homogeneous isotropic case: Minimal deterministic Matlab program // *Computer Physics Communications*. 2010. Vol. 181. P. 1776–1788.

11. **Аристов В. В., Забелок С. А.** Детерминистический метод решения уравнения Больцмана с параллельными вычислениями // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2002. Т. 42, № 3. С. 325–336.

12. **Alekseenko A., Josyla E.** Deterministic solution of the spatially homogeneous Boltzmann equation using discontinuous Galerkin discretizations in the velocity space // *Journal of Computational Physics*. 2014. Vol. 272. P. 170–188.

13. **Malkov E. A., Ivanov M. S.** Parallelization of algorithms for solving the Boltzmann equation for GPU-based computations // *AIP Conf. Proc.* 2011. Vol. 1333. P. 946–951.

14. **Малков Е. А., Иванов М. С.** Детерминированный метод частиц-в-ячейках для решения задач динамики разреженного газа. Часть I // *Вычислительные методы и программирование*. 2011. Т. 12, № 3. С. 368–374.

A. A. Aristov, Professor, Chief Researcher, e-mail: aristovvl@yandex.ru,
Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS,
MIREA — Russian Technological University,
A. V. Stroganov, Assistant Professor, e-mail: savthe@gmail.com,
A. D. Yastrebov, PhD Student, e-mail: andryast711@gmail.com,
MIREA — Russian Technological University

Development of a Parallel Deterministic Method of Solving the Boltzmann Equation and its Application Using OpenCL

We propose an optimized algorithm for deterministic method of solving the Boltzmann kinetic equation using parallel computation. We show the examples of application of proposed algorithm for solving economic problem of wealth distribution. Utilization of time and memory resources is discussed and compared to the method described in the previous works. We show that proposed algorithm is useful for solving the kinetic problems.

Keywords: Boltzmann equation, deterministic method, econophysics, parallel computations, OpenCL

DOI: 10.17587/it.26.266-273

References

1. **Kogan M. N.** Rarefied gas dynamics, Moscow, Nauka, 1967, 440 p. (in Russian).

2. **Chatterjee A., Yarlagadda S., Chakrabarti B. K.** *Econophysics of Wealth Distributions*, Springer Verlag, Milan, 2005, 248 p.

3. **Chakrabarti K., Chakraborti A., Chakravarty S. R., Chatterjee A.** *Econophysics of Income and Wealth Distributions*, Cambridge, Cambridge University Press, 2013, 222 p.

4. **Dragulescu A. A., Yakovenko V. M.** Exponential and power-law probability distributions of wealth and income in the United Kingdom and the United States, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2001, vol. 299, pp. 213–221.

5. **Dragulescu A., Yakovenko V. M.** Statistical mechanics of money, *Eur. Phys. J. B*, 2000, vol. 17, iss. 4, pp. 723–729.

6. **Angle J.** Deriving the size distribution of personal wealth from "the rich get richer, the poor get poorer", *Journal of Mathematical Sociology*, 1993, vol. 18, pp. 27–46.

7. **Cordier S., Pareschi L., Toscani G.** On a Kinetic Model for a Simple Market Economy, *Journal of Statistical Physics*, 2005, vol. 120, pp. 253–277.

8. **Aristov V. V.** *Doklady Mathematics USSR*, 1985, vol. 283, no. 4, pp. 831–834 (in Russian).

9. **Aristov V. V.** Direct methods for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2001.

10. **Asinari P.** Nonlinear Boltzmann equation for the homogeneous isotropic case: Minimal deterministic Matlab program, *Computer Physics Communications*, 2010, vol. 181, pp. 1776–1788.

11. **Aristov V. V., Zabelok S. A.** *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2002, vol. 42, no. 3, pp. 325–336 (in Russian).

12. **Alekseenko A., Josyla E.** Deterministic solution of the spatially homogeneous Boltzmann equation using discontinuous Galerkin discretizations in the velocity space, *Journal of Computational Physics*, 2014, vol. 272, pp. 170–188.

13. **Malkov E. A., Ivanov M. S.** Parallelization of algorithms for solving the Boltzmann equation for GPU-based computations, *AIP Conf. Proc.*, 2011, vol. 1333, pp. 946–951.

14. **Malkov E. A., Ivanov M. S.** *Numerical methods and programming*. 2011, vol. 12, no. 3, pp. 368–374 (in Russian).

Рисунки к статье В. В. Аристова, А. Д. Ястребова, А. В. Строганова
«РАЗВИТИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ДЕТЕРМИНИСТИЧЕСКОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ
УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА И ЕГО РЕАЛИЗАЦИЯ С ПОМОЩЬЮ OpenCL»

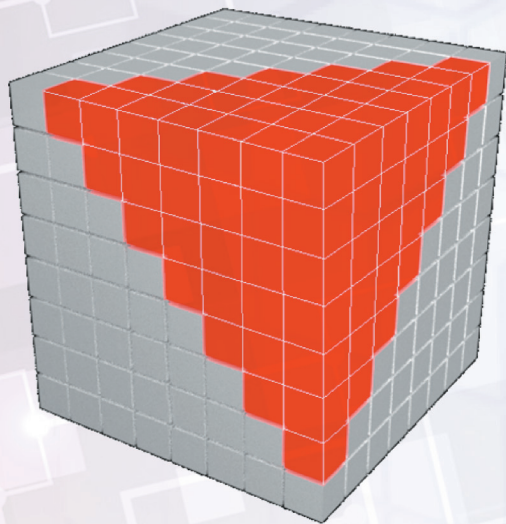


Рис. 1. Нулевые элементы $\hat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ при $M=8$

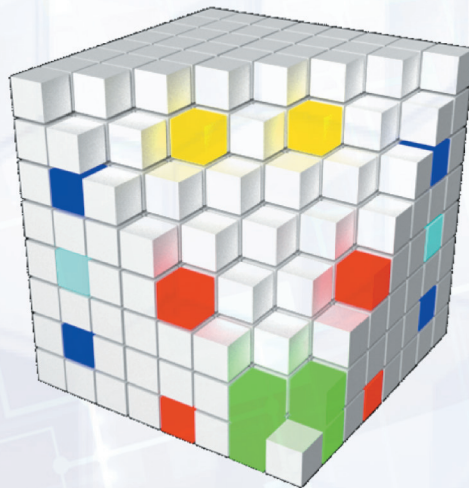


Рис. 2. Элементы $\hat{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ с равными значениями при $M=8$