

На правах рукописи



Марченко Михаил Александрович

**Численное статистическое моделирование  
кинетических процессов диффузии, коагуляции  
и переноса заряженных частиц с использованием  
распределенных вычислений**

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Новосибирск – 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук (ИВМиМГ СО РАН), г. Новосибирск.

**Научный консультант:**

*Рогазинский Сергей Валентинович*

доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией, г. Новосибирск.

**Официальные оппоненты:**

*Лемешко Борис Юрьевич*

доктор технических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский государственный технический университет», главный научный сотрудник, г. Новосибирск.

*Перцев Николай Викторович*

доктор физико-математических наук, профессор, Омский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института математики им. С.Л. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук, главный научный сотрудник, г. Омск.

*Сушкевич Тамара Алексеевна*

доктор физико-математических наук, Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук», главный научный сотрудник, г. Москва.

**Ведущая организация:**

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики». г. Санкт-Петербург.

Защита состоится 28 февраля 2017 г. в 15-00 на заседании диссертационного совета Д 003.061.02 на базе ИВМиМГ СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 6.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИВМиМГ СО РАН и на сайте <http://icmng.nsc.ru>.

Автореферат разослан 27 октября 2016 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 003.061.02,  
д.ф.-м.н.



С.Б. Сорокин

# Общая характеристика работы

## Актуальность темы исследования

Уровень производительности современных суперкомпьютеров делает применение вероятностных моделей кинетических процессов чрезвычайно актуальным, поскольку, с одной стороны, такие модели адекватно описывают физические явления, в частности, позволяют учесть влияние маловероятных событий, что практически невозможно для других подходов; с другой стороны, они могут быть эффективно реализованы в виде параллельных программ.

В различных приложениях (финансы, телекоммуникационные системы, экология и др.) часто применяются вероятностные диффузионные модели, связанные с оценкой функционалов, определяемых маловероятными событиями, состоящими в достижении траекториями диффузионного процесса заданных областей фазового пространства. Такие задачи традиционно сложны для численного анализа, так как методы, основанные на прямом моделировании траекторий, как правило, требуют значительных вычислительных затрат. При использовании специальных методов уменьшения трудоемкости важно исследовать их эффективность в зависимости от параметров задачи и алгоритма, применяя распределенные вычисления и параллельно реализуемые генераторы псевдослучайных чисел на суперкомпьютерных системах (работы М. Villen-Altamirano, 1991–2016; Р. L'Escuyer, 2006; G. Rubino, В. Tuffin, 2009 и др.). Вопросы применимости различных методов (метода расщепления, весового моделирования по ценности) для решения конкретных диффузионных задач, в частности при изменении параметров вероятностной модели, практически не исследованы, что определяет актуальность данной темы.

Для численного анализа процессов коагуляции в дисперсных системах, например при образовании атмосферных аэрозолей, пламенном синтезе наноразмерных частиц и др., успешно применяются вероятностные модели, основанные на рассмотрении эволюции многочастичных ансамблей (работы М.С. Иванова и С.В. Рогазинского, 1988; В.А. Галкина, 2009; М. Kraft с соавторами, 2003–2016 и др.). В целях достижения удовлетворительной погрешности оценок функционалов число частиц в ансамбле предполагается достаточно большим (порядка  $10^7 \div 10^9$ ), что влечет необходимость использования хорошо сбалансированных методов распараллеливания. В этой связи возникает задача оценки эффекта от распараллеливания при одновременном увеличении числа процессоров и числа частиц. В настоящее время только начинают ставиться вопросы разработки экономичных численных методов для решения нелинейного уравнения коагуляции с учетом внешнего поля скоростей, зависящего от пространственной переменной и размера (массы) частиц, и пространственно неоднородного ядра коагуляции. Кроме того, практически не исследованы вопросы эффективной параллельной

реализации алгоритмов численного статистического моделирования кинетических процессов коагуляции на современных высокопроизводительных вычислительных системах.

При численном исследовании кинетических процессов переноса заряженных частиц в газе, например при лавинном пробое, искровом разряде и др., весьма актуально использование методов, основанных на моделировании траекторий ветвящихся процессов, представляющих частицы в лавине (работы А.М. Кольчужкина и В.В. Учайкина, 1978; А.Ф. Аккермана, 1991 и др.). С развитием компьютерной техники возросла потребность в экономичных алгоритмах и параллельных программах, позволяющих учитывать влияние маловероятных событий, эффективно моделировать разные стадии развития пробоя, например, образование высокоэнергетичных (убегающих) электронов. Как правило, число частиц в лавине достаточно велико (порядка  $10^6 \div 10^9$ ), поэтому необходимо разрабатывать и апробировать эффективные технологии распараллеливания. Однако к настоящему времени вопросы эффективной параллельной реализации трудоемких алгоритмов моделирования траекторий ветвящихся процессов исследованы недостаточно полно.

В приложениях численного статистического моделирования необходимо использовать параллельные генераторы псевдослучайных чисел, эффективно реализуемые на многопроцессорных компьютерах, и применять методологию распределенных вычислений, позволяющую осуществлять параметрический анализ вероятностных моделей (т.е. исследовать их характеристики, такие как погрешность оценки и трудоемкость вычислений, в зависимости от параметров задачи и алгоритма); требуется также наличие стандартных распараллеленных программных инструментов (работы С.М. Ермакова и А.С. Сипина, 2014; Р. L'Esuyer, 2005–2016; М. Mascagni с соавторами, 2003–2016 и др.). При этом практически важно оценивать масштабируемость алгоритмов на большое число процессоров (работы В.П. Иванникова с соавторами, 2006–2008; Ю.Г. Бартенева с соавторами, 2010–2012). Существующие методы параллельной генерации псевдослучайных чисел плохо приспособлены для осуществления параметрического анализа вероятностных моделей; в свою очередь, разработанное программное обеспечение не может способствовать решению такого рода задач. Кроме того, недостаточно проработаны вопросы оценки масштабируемости алгоритмов распределенного численного статистического моделирования. Все перечисленное определяет актуальность данной темы исследований.

### **Цели и задачи диссертационной работы**

1. Создание и исследование вероятностных моделей и реализующих их экономичных параллельных алгоритмов численного статистического моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц.

2. Разработка параллельного генератора псевдослучайных чисел и методики распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем, обеспечивающих возможность проведения коррелированных расчетов и параметрического анализа реализуемых вероятностных моделей.
3. Создание пакета параллельных прикладных программ для решения задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, и стандартных библиотек для реализации распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах с различными архитектурами.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Разработка и исследование эффективных алгоритмов распределенного численного статистического моделирования на основе методов расщепления и весового моделирования для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов, таких как вероятность недостижения границы области траекториями за заданное время и полная концентрация траекторий в точке за заданное время [1, 2, 4, 37–39, 55].
2. Разработка и исследование вероятностной модели для численного моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции, основанной на применении пространственной регуляризации ядра коагуляции и метода мажорантной частоты, и реализующего ее параллельного алгоритма [6, 7, 10, 11, 34–36, 40, 41, 43–49, 57–59].
3. Разработка и исследование вероятностной модели для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе, основанной на использовании ветвящихся процессов, и реализующего ее параллельного алгоритма [15, 18, 19, 31, 61].
4. Разработка и исследование длиннопериодных параллельных генераторов псевдослучайных чисел и методики распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем [3, 8, 9, 29, 32, 42, 51, 56].
5. Разработка имитационной модели исполнения программ распределенного численного статистического моделирования с целью получения оценок их масштабируемости на большое число процессоров [14, 16, 17, 30, 52–54, 62].
6. Разработка универсальных библиотек распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем и параллельных прикладных программ для решения задач диффузии, коагуляции, переноса заряженных частиц и численного анализа стохастических осцилляторов [5, 12, 13, 20–28, 33, 50, 60, 63].

## Методы исследования

В диссертации применяются: уравнение Колмогорова, учитывающее эволюцию ансамбля частиц; ветвящиеся процессы; теория интегральных уравнений второго рода; методы расщепления и весового моделирования с использованием приближения к функции ценности; различные методики распараллеливания; распределительный способ получения псевдослучайных чисел; имитационное моделирование на основе мультиагентного подхода.

## Научная новизна

Разработаны и исследованы новые алгоритмы и программные средства суперкомпьютерного статистического моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, а именно:

- алгоритмы численного статистического моделирования на основе метода расщепления и весового моделирования с использованием приближения к функции ценности для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов;
- вероятностная модель для численного моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции, основанная на пространственной регуляризации ядра коагуляции и методе мажорантной частоты, и реализующий ее экономичный параллельный алгоритм;
- вероятностная модель для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе на основе ветвящихся случайных процессов и реализующий ее параллельный алгоритм для вычислительных систем с массивно-параллельной и гибридной архитектурами;
- распределительный способ получения базовых псевдослучайных чисел и методика распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем, обеспечивающие возможность проведения коррелированных расчетов и параметрического анализа реализуемых вероятностных моделей;
- имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах с учетом их архитектуры;
- универсальные библиотеки **PARMONC**, **PARMONC-PC** и **MONC** для реализации распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах, а также программный комплекс параллельных генераторов **PARGENER-MC**;
- пакет параллельных прикладных программ **BOUNDARY-MC**, **COAGULATION-MC**, **CONCENTRATION-MC**, **ELSHOW** и **AMIKS** для решения задач диффузии, коагуляции, переноса заряженных частиц и численного анализа стохастических осцилляторов.

## **Теоретическая и практическая значимость**

Разработанные вероятностные модели кинетических процессов могут применяться при создании и обосновании методов численного решения прикладных задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц; созданные библиотеки и пакет программ могут быть использованы для практической реализации вероятностных моделей. Предложенная имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования может применяться для оценки масштабируемости прикладных программ и настройки необходимых параметров параллельных расчетов на современных вычислительных системах.

У автора имеются акты о внедрении научных и практических результатов диссертации, в частности, библиотека PARMONC внедрена в Центре коллективного пользования «Сибирский суперкомпьютерный центр» СО РАН (ЦКП ССКЦ СО РАН), а также использовалась в ходе выполнения научно-исследовательских работ по государственному контракту № 07.514.11.4016 от 19.08.2011 г.

## **Личный вклад автора**

Все основные научные результаты диссертационной работы получены лично автором или при его непосредственном участии, которое заключается:

- в построении, обосновании и верификации вероятностных моделей для численного моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, а также реализующих их экономичных параллельных алгоритмов численного статистического моделирования;
- в создании и исследовании параллельных генераторов псевдослучайных чисел и методики распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах с реализацией возможности параметрического анализа вероятностных моделей;
- в формировании имитационной модели исполнения параллельных программ статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах и получении с ее помощью оценок масштабируемости конкретных программ;
- в разработке универсальных библиотек численного статистического моделирования и пакета прикладных программ.

У автора отсутствует конфликт интересов с соавторами по публикациям и свидетельствам о государственной регистрации программы для ЭВМ.

## **Степень достоверности и апробация результатов**

Достоверность разработанных вероятностных моделей подтверждается в расчетах путем сравнения результатов с известными численными и экспериментальными данными при решении аналогичных задач; достоверность эффективности параллельных алгоритмов, библиотек и прикладных программ подтвер-

ждается их практическим применением на высокопроизводительных вычислительных системах.

Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на семинарах «Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике», «Высокопроизводительные вычисления», «Математическое обеспечение высокопроизводительных вычислительных систем», «Численный анализ» в ИВМиМГ СО РАН (1999–2016 гг.), а также на всероссийских и международных конференциях: «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» (2014, 2015); International Workshop on Simulation (2001–2015); «Научный сервис в сети Интернет» (2011, 2012); «Параллельные вычислительные технологии» (2012, 2013); International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (2014) и других научных семинарах и мероприятиях.

### **Публикации**

Материалы диссертации представлены в 63 печатных работах и свидетельствах о регистрации программ для ЭВМ. Основные результаты диссертации содержатся в 19 статьях в журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий ВАК [1–19]. Получено девять свидетельств о государственной регистрации программы для ЭВМ [20–28]. Результаты также опубликованы в изданиях, индексируемых Scopus и Web of Science [29–32], в работах [33–63].

### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы и трех приложений. Общий объем диссертации – 281 страница. Список литературы включает 312 наименований на 31 странице. Диссертация содержит 36 рисунков, 27 таблиц.

### **Благодарности**

Автор выражает благодарность чл.-корр. РАН Г.А. Михайлову, д.ф.-м.н. С.В. Рогазинскому и д.т.н., проф. Б.М. Глинскому за постоянное внимание к проводимым исследованиям, помощь и полезные дискуссии.

### **Содержание работы**

**Во Введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы ее цели и задачи, представлены методы исследований, аргументированы научная новизна полученных результатов, их теоретическая и практическая значимость, отображен личный вклад автора, обосновано соответствие результатов диссертации паспорту научной специальности 05.13.18.

**В главе 1** делается обзор актуальных задач и методов численного статистического моделирования кинетических процессов, параллельных и распределенных вычислений.

**В п. 1.1** представлен обзор работ по решению диффузионных задач методом численного статистического моделирования, в том числе, связанных с моде-



лированием маловероятных событий. В п. 1.2 делается анализ материалов по вопросам решения линейных и нелинейных кинетических уравнений методами прямого статистического моделирования. В п. 1.3 представлены современные результаты по параллельной реализации численного статистического моделирования и генераторов псевдослучайных чисел, по оценке масштабируемости параллельных алгоритмов.

В главе 2 представлены методы прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов с использованием распределенных вычислений.

В п. 2.1 рассматриваются задачи оценки функционалов на траекториях диффузионных процессов и применение распределенных вычислений.

Пусть  $m$ -мерный диффузионный процесс  $y(\cdot)$  задан автономной системой стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) в смысле Ито:

$$dy(t) = a(y(t))dt + b(y(t))dw(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad y(0) = y_0,$$

где  $a(y)$  –  $m$ -мерная векторная функция сноса;  $b(y) = \{b_{ij}(y)\}$  – матричная функция диффузии размерности  $m \times m$ ;  $w(t)$  –  $m$ -мерный винеровский процесс;  $y_0$  – случайный вектор.

Рассматривается задача вычисления следующих функционалов от траекторий решения СДУ:  $\Phi(y(\cdot), T) = \mathbf{E} \left[ \int_0^{\min(T, \tau)} h(y(t))dt + \psi(y(\tau)) \right]$ , где  $\tau$  – момент поглощения траектории  $y(\cdot)$ , функции  $h(\cdot)$  и  $\psi(\cdot)$  кусочно-непрерывны в  $R^m$ .

Пусть для СДУ задана приближенная траектория  $\{y_i\}$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, n$ , полученная по методу Эйлера на равномерной сетке с постоянным шагом интегрирования  $\Delta t = T/n$ . Рассмотрим случайную величину  $\zeta_D$ , являющуюся функцией приближенной траектории  $\{y_i\}$ , такую что  $\varphi = \mathbf{E}\zeta_D \approx \Phi$ , причем  $|\Phi - \varphi| \leq C(\Delta t)^r$ ,  $0 < r \leq 1$ . Величину  $\zeta(t, y)$  называют **оценкой прямого моделирования** или **аналоговой оценкой**.

Рассмотрим две постановки задачи параметрического анализа трудоемкости статистических оценок:

- в рамках **дискретной постановки** для приближенной траектории фиксирован шаг  $\Delta t$ ; трудоемкость исследуется при  $T \rightarrow +\infty$ ;
- в рамках **непрерывной постановки** фиксировано значение  $T$ ; трудоемкость исследуется при  $\Delta t \rightarrow 0$ .

В п. 2.2 представлены методы прецизионной оценки малой вероятности недостижения границы области траекториями диффузионного процесса за заданное время.

В п. 2.2.1 рассмотрена аналоговая оценка вероятности. Обозначим через  $p(T, 0, y_0)$  вероятность недостижения случайным процессом  $y(\cdot)$  границы  $\Gamma$  об-

ласти  $\Omega$  за время от 0 до  $T$  при условии, что случайный процесс начинается в точке  $y_0 \in \Omega$  в момент времени 0.

При больших значениях  $T$  поведение точной вероятности  $p(T, 0, y_0)$  определяется экспоненциальным сомножителем первого члена ее разложения по собственным функциям эллиптического оператора:  $p(T, 0, y_0) \approx \exp(-\rho T)$ ,  $\rho \geq 0$ .

Соответствующая приближенная вероятность  $\varphi(T, 0, y_0)$  записывается в виде многократного интеграла  $\varphi = \int \dots \int \prod_{i=0}^{n-1} [r_E(y_i \rightarrow y_{i+1}) \chi_\Omega(y_{i+1})] dy_1 \dots y_n$ , где  $r_E(y_i \rightarrow y_{i+1})$  – переходная плотность в методе Эйлера и аналоговую оценку  $\zeta_D$  можно записать в виде произведения  $\zeta_D = \prod_{i=0}^n \chi_\Omega(y_i)$ .

При больших значениях  $T$  трудоемкость аналоговой оценки имеет порядок величины  $C(\zeta_D) \sim \exp(\rho T)/\Delta t$ , таким образом, ее нецелесообразно использовать на практике.

В п. 2.2.2 описана расщепленная оценка вероятности недостижения границы области (метод расщепления).

Рассмотрим моменты времени  $0 \leq T_1 < T_2 < \dots < T_k \leq T$  (точки расщепления), вектор с натуральными компонентами  $\bar{n} = (n_1, n_2, \dots, n_k)$  и определим случайную величину  $\zeta_S(k, \bar{n})$ , называемую **расщепленной оценкой**, следующим образом: в каждой точке расщепления  $T_i$  траектория разделяется (расщепляется) на  $n_i$  условно независимых траекторий, вклад в оценку для каждой такой траектории учитывается с весом  $1/n_i$ . Известно, что расщепленная оценка является несмещенной, ее дисперсия меньше дисперсии аналоговой оценки.

С целью получения оценки с наименьшей трудоемкостью предлагается методика оптимального выбора параметров метода расщепления: числа точек расщепления  $k$ , их расположения  $T_1, T_2, \dots, T_k$  и вектора  $\bar{n} = (n_1, n_2, \dots, n_k)$ .

Показано, что для дискретной постановки задачи трудоемкость расщепленной оценки имеет порядок величины  $C(\zeta_S) \sim T^2$ , следовательно, при больших значениях  $T$  она дает существенный выигрыш по сравнению с аналоговой оценкой.

В п. 2.2.3 предложена весовая оценка вероятности недостижения границы области с использованием приближения к функции ценности.

Пусть траектории моделируются согласно новой переходной плотности  $g_{t_i}(y_i \rightarrow y_{i+1})$ . Тогда  $\varphi = \mathbf{E}\zeta_W = \mathbf{E} \left[ \prod_{i=0}^{n-1} q_{t_i}(y_i, y_{i+1}) \right]$ , где  $q_{t_i}(y_i, y_{i+1}) = k(y_i, y_{i+1})/g_{t_i}(y_i \rightarrow y_{i+1})$ ,  $k(y_i, y_{i+1}) = r_E(y_i \rightarrow y_{i+1})\chi_\Omega(y_{i+1})$ ; случайная величина  $\zeta_W$  называется **весовой оценкой**  $\zeta_W$ .

**Теорема 1.** Если для весовой оценки переходная плотность имеет вид  $g_t(y \rightarrow y_1) = k(y, y_1)\varphi(T, t_1, y_1)(1 + \varepsilon(t_1, y_1))/C(t, y)$ , где  $|\varepsilon(t, y)| \leq C_1(\Delta t)^r$  равномерно по  $t, y$ ,  $0 < r \leq 1$ , то для ее дисперсии выполняется неравенство

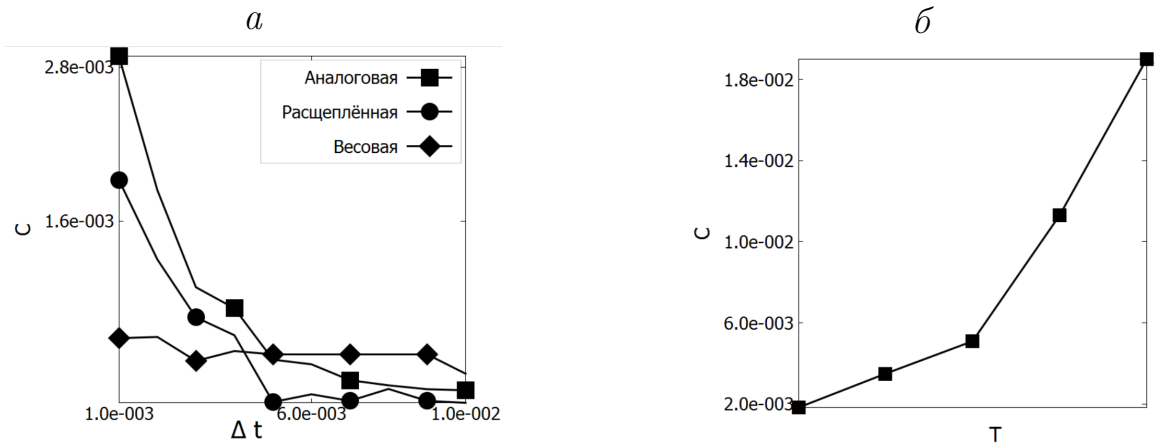


Рис. 1. Исследование трудоемкости оценок: *a* – непрерывная постановка задачи: квадраты – трудоемкость аналоговой оценки, кружки – расщепленной, ромбы – весовой; *б* – дискретная постановка задачи: трудоемкость расщепленной оценки

$D\zeta_W \leq C_2 T (\Delta t)^{2r-1}$  равномерно по  $y_0$ .

Из доказанной теоремы следует, что для весовой оценки, переходная плотность которой близка к «идеальной» плотности  $g_{t_i}(y_i \rightarrow y_{i+1}) = k(y_i, y_{i+1}) \varphi(T, t_{i+1}, y_{i+1}) / C(t_i, y_i)$ , порядок величины трудоемкости при  $\Delta t \rightarrow 0$  определяется выражением  $C(\zeta_W) \sim (\Delta t)^{2r-2}$ .

В качестве приближения к функции ценности предлагается использовать первую собственную функцию  $X_1(y)$  эллиптического оператора, соответствующего уравнению Колмогорова для точной вероятности недостижения границы.

Показано, что для непрерывной постановки задачи трудоемкость весовой оценки имеет порядок величины  $C(\zeta_W) \sim T^2 \varphi^{-2}$ , следовательно, при  $\Delta t \rightarrow 0$  она обеспечивает существенное преимущество в трудоемкости по сравнению с аналоговой оценкой.

В п. 2.2.4 представлены результаты верификации теоретических выводов с использованием распределенных вычислений.

В расчетах на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН использовались разработанные в диссертации параллельная программа BOUNDARY-МС и библиотека PARMONC; их применение обеспечило возможность эффективного анализа трудоемкости разработанных методов в зависимости от параметров  $\Delta t$  и  $T$  при решении тестовых задач. Достигнутый уровень статистической погрешности оценки функционалов составил менее 1 %. На рис. 1 представлены результаты численного исследования трудоемкости метода расщепления и весового моделирования для непрерывной и дискретной постановок.

В п. 2.3 рассмотрена задача прецизионной оценки полной концентрации траекторий диффузионного процесса в удаленной от источника точке за заданное время.

В п. 2.3.1 предложена аналоговая оценка концентрации. Рассматривается задача вычисления полной концентрации  $\Phi(T, y_c)$  диффузионных траекторий

во временном интервале от 0 до  $T$  в некоторой удаленной от источника точке  $y_c$ . Показано, что  $\Phi(T, y_c) \approx E \int_0^T w(y(t)) dt$ , где  $w(y) = \chi_{\Omega_c}(y)/V_c$ ;  $\Omega_c$  – шар радиуса  $r_c$  с центром в точке  $y_c$ ;  $V_c$  – объем шара. Функционал  $\Phi(T, y_c)$  можно оценить с помощью математического ожидания от аналоговой оценки:  $\Phi \approx \varphi(z) = E\zeta_D(z) = E \sum_{i=0}^n w(y_i) \Delta t$ ; здесь траектории начинаются в точке  $z = (0, y_0)$ .

Трудоёмкость аналоговой оценки имеет порядок величины  $C(\zeta_D(z)) \sim C\Delta t^{-1}$ , что означает нецелесообразность ее использования на практике.

В п. 2.3.2 предложена весовая оценка концентрации с использованием приближения к функции ценности.

**Теорема 2.** Если в выражении для «идеальной» плотности с нулевой дисперсией  $p_M(z, z_1) = k(z, z_1)\varphi(z_1)/[K\varphi](z)$  функцию ценности  $\varphi$  заменить на приближение  $\varphi_a(z) = C(1 + \varepsilon(z))\varphi(z)$  ( $|\varepsilon(z)| \leq C(\Delta t)^r$ ,  $0 < r \leq 1$ ) и предположить, что траектории, моделируемые по весовому методу, обрываются только на правой границе  $T$  временного интервала, то для соответствующей весовой оценки  $D\zeta_W(z) \leq C_1 \cdot T(\Delta t)^{2r-1}$ .

Из доказанной теоремы следует, что трудоёмкость построенной весовой оценки имеет порядок величины  $C(\zeta_W) \sim C(\Delta t)^{2r-2}$ . Отсюда видно, что если  $r \geq 0,5$ , то при  $\Delta t \rightarrow 0$  величина трудоёмкости весовой оценки возрастает медленней по сравнению с трудоёмкостью аналоговой.

При построении приближения к функции ценности используется точная концентрация  $\Phi(\cdot)$  для 3-мерной системы СДУ с постоянным вектором сноса  $A$ , постоянной матрицей диффузии  $B$  и нулевым начальным условием.

В п. 2.3.3 представлена методика комбинирования прямого моделирования, методов расщепления и весового моделирования для улучшения оценки концентрации, которая формулируется следующим образом: из источника начинается прямое моделирование траектории; при попадании траектории в шар  $\Omega_S$  (в момент времени  $t$  в узле  $y$ ) – переход к методу расщепления. Таким образом, начиная с точки  $z = (t, y)$  строятся  $s$  условно независимых оценок  $\zeta^{(i)}(z)$  ( $i = 1, \dots, s$ ) и для каждой из них сначала производится прямое моделирование; при попадании каждой из расщепленных траекторий в шар  $\Omega_w$  происходит переход на весовое моделирование, а при выходе из  $\Omega_w$  опять происходит возвращение к прямому моделированию. Предлагается также методика выбора параметров комбинированной оценки.

В п. 2.3.4 представлены результаты верификации теоретических выводов с использованием распределенных вычислений. В расчетах на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН использовались разработанные в диссертации программа CONCENTRATION-MS и библиотека PARMONS. Их применение обеспечило возможность эффективного анализа трудоёмкости разработанных методов

в зависимости от параметра  $\Delta t$ . При верификации использовались СДУ с постоянными векторами сноса и матрицами диффузии, причем для концентрации известно точное значение. Достигнутый уровень статистической погрешности оценки функционалов составил около 1 %. Показано, что разработанная комбинированная методика позволяет существенно уменьшить трудоемкость расчетов по сравнению с прямым моделированием.

**В главе 3** представлены методы численного статистического моделирования кинетического процесса пространственно неоднородной коагуляции с использованием распределенных вычислений.

**В п. 3.1** предложена вероятностная модель для численного моделирования кинетического процесса пространственно неоднородной коагуляции; рассматривается задача Коши для неограниченной по числу уравнений системы нелинейных уравнений (уравнение коагуляции):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial t} + \operatorname{div}(v_1 c_1) &= -c_1 \sum_{j=1}^{\infty} K(x; 1, j) c_j, \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} + \operatorname{div}(v_i c_i) &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K(x; i-j, j) c_{i-j} c_j - c_i \sum_{j=1}^{\infty} K(x; i, j) c_j, \quad i \geq 2, \\ c_i(0, x) &= c_i^0(x), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (t, x) \in \Omega \times (0, T], \quad \Omega \subset R^3, \quad T < \infty \end{aligned}$$

где  $c_i = c_i(t, x)$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) – концентрация  $i$ -меров (частиц размера  $i$ ) в момент времени  $t$  в точке  $x$ ,  $v_i = v_i(x)$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) – пространственно неоднородное поле скоростей,  $K(x; i, j)$  – ядро коагуляции,  $c_i^{(0)}(x)$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) – концентрация  $i$ -меров при  $t = 0$ . Рассматриваются следующие функционалы от решения уравнения коагуляции:

$$\varphi_i(T) = \int_G c_i(T, x) dx, \quad G \subseteq \Omega.$$

Тестовой частицей называют пару значений  $p = (l, x)$ , где  $l$  – размер частицы,  $x \in R^3$  – ее координата. Моделируются независимые реализации ансамбля тестовых частиц  $\xi = \xi(T) = \{p_1, p_2, \dots, p_N\}$ ,  $N = N(T)$ . Обозначим  $N_0 = N(0)$ .

Функционал  $\varphi_i(T)$  оценивается по формуле  $\varphi_i(T) \approx E \zeta_i \approx L^{-1} \sum_{k=1}^L \zeta_i^{(k)}$ ,

где  $\zeta_i^{(k)} = \zeta_i(\xi^{(k)}(T)) = n_{\xi}(T, i, G)/N_0$ ;  $n_{\xi}(T, i, G)$  – число тестовых частиц при  $t = T$ , для которых  $l = i$ ,  $x \in G$ .

Производится пространственная регуляризация ядра коагуляции с целью замены взаимодействия частиц в точке их взаимодействием в малой области; это делается двумя способами:

- 1) область  $\Omega$  разбивается на малые непересекающиеся подобласти  $\Omega_1, \dots, \Omega_S$  (ячейки), регуляризованное ядро записывается следующим образом:

$$K^\rho(p_1, p_2) = \sum_{s=1}^S \rho_s^{-1} \chi_{\Omega_s}(x_1) \chi_{\Omega_s}(x_2) K(x_s^*; l_1, l_2),$$

где  $\rho_s$  – объем  $\Omega_s$ ;  $\chi_{\Omega_s}(x)$  – индикаторная функция  $\Omega_s$ ;  $x_s^*$  – некоторая точка из  $\Omega_s$ ;

- 2) считается, что взаимодействие происходит при попадании пары частиц внутрь шара заданного радиуса  $r$ ; в таком случае

$$K^\rho(p_1, p_2) = h(x_1, x_2) K(x^*; l_1, l_2),$$

где  $x_s^*$  – центр шара,  $h(x_1, x_2) = 0$ , если  $|x_1 - x_2| > r$  и  $h(x_1, x_2) = (4/3 \pi r^3)^{-1}$ , если  $|x_1 - x_2| < r$ .

Допустим, что для ядра коагуляции существует мажоранта  $K(x; i, j) \leq \widehat{K} < \infty$ . Тогда мажоранта для регуляризованного ядра запишется в виде

$$\widehat{K}^\rho(p_1, p_2) = \widehat{K} \rho^{-1},$$

где  $\rho = \min_{s=1, \dots, S} \rho_s$  для первого способа регуляризации;  $\rho = (4/3) \pi r^3$  для второго.

Отметим, что для рассматриваемого уравнения коагуляции такая пространственная регуляризация ядра коагуляции предлагается впервые.

Разобьем интервал  $[0, T]$  на подынтервалы длиной  $\Delta t$ ; на каждом разделим моделирование процессов коагуляции и пространственного перемещения частиц. По методу мажорантной частоты, обеспечивающему линейную зависимость трудоемкости моделирования от числа модельных частиц, построим алгоритм моделирования реализации  $\xi = \xi(T)$  (**однопроцессорный алгоритм**), который состоит из следующих шагов:

1. моделирование начального распределения ансамбля частиц согласно функции  $c_i^{(0)}(x)$ ;
2. моделирование случайной величины  $\tau$ , времени между двумя коагуляционными актами, по экспоненциальному закону с параметром  $\widehat{\nu} = 0.5(N_0 \rho)^{-1} \cdot N(N-1)\widehat{K}$ ; при достижении суммой времен между актами коагуляции значения  $\Delta t$  – переход к шагу 6;
3. выбор пары частиц  $(p_i, p_j)$  равновероятно из множества всех пар;
4. моделирование фиктивного или реального коагуляционного акта для выбранной пары согласно заданной вероятности; когда происходит реальный коагуляционный акт, выбранная пара  $(p_i, p_j)$  образует одну частицу, и состояние ансамбля изменяется; при фиктивном акте состояние ансамбля остается прежним;
5. переход к п. 2;

6. моделирование пространственного перемещения частиц: для каждой частицы  $p = (l, x)$  новая координата вычисляется по формуле  $x' = x + \Delta t v_l(x)$ ; перемещению соответствует время  $\Delta t$ ;
7. по достижении суммой времен на перемещение времени  $T$  – прекращение моделирования реализации, иначе – переход к п. 2.

Отметим, что для рассматриваемого уравнения коагуляции такой алгоритм метода мажорантной частоты предлагается впервые.

В п. 3.2 записано интегральное уравнение Фредгольма второго рода для плотности актов коагуляции, вероятностная интерпретация которого соответствует однопроцессорному алгоритму. Это уравнение используется при выводе соотношения для дисперсии статистических оценок функционалов  $\varphi_i$ . Доказывается конечность дисперсии оценок и делаются выводы о ее зависимости от параметров алгоритма. Отмечается, что при  $N_0 \rightarrow \infty$  рассмотренный алгоритм дает оценки частот, сходящиеся к решению уравнения коагуляции при выполнении условия молекулярного хаоса.

В п. 3.3 описывается параллельный алгоритм, реализующий вероятностную модель процесса пространственно неоднородной коагуляции.

Предполагается, что число тестовых частиц  $N$  настолько велико, что памяти одного процессора недостаточно для размещения реализации  $\xi$ . Рассмотрим вычислительную систему, состоящую из  $M$  процессоров. Область  $\Omega$  разделяется на  $M$  непересекающихся **процессорных областей**  $\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2, \dots, \hat{\Omega}_M$ . Тестовые частицы сортируются по процессорным областям и в каждой  $\hat{\Omega}_m$  моделируется эволюция соответствующей части ансамбля:  $\xi^{(m)} = \{p_1^{(m)}, p_2^{(m)}, \dots, p_{n_m}^{(m)}\}$ , где  $n_m$  – число частиц в  $m$ -й процессорной области,  $\xi = \{\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \dots, \xi^{(M)}\}$ .

Для параллельного алгоритма мажорантную частоту запишем в виде

$$\hat{\nu} = \sum_{m=1}^M \hat{\nu}_m, \quad \text{где } \hat{\nu}_m = 0.5 N_0^{-1} \sum_{i \neq j} \hat{K}^\rho(p_i, p_j),$$

причем в последней формуле суммирование производится по частицам из  $\hat{\Omega}_m$ .

Параллельное моделирование выполняется в следующем порядке:

1. каждый процессор моделирует начальное распределение частиц независимо от других процессоров (см. п. 1 однопроцессорного алгоритма);
2. на каждом процессоре на шаге  $\Delta t$  все коагуляционные акты (реальные и фиктивные) моделируются независимо от других процессоров (см. пп. 2–5 однопроцессорного алгоритма); на  $m$ -м процессоре время между коагуляционными актами  $\tau_m$  будет экспоненциально распределенным с параметром  $\hat{\nu}_m = 0.5(N_0\rho)^{-1}n_m(n_m - 1)\hat{K}$ ;
3. в конце шага  $\Delta t$  все процессоры обмениваются частицами (см. п. 6 однопроцессорного алгоритма); обмену соответствует время  $\Delta t$ ;

4. по достижению суммой времен на обмен максимального значения времени  $T$  – прекращение моделирования реализации, иначе – переход к п. 2.

В п. 3.4 представлены результаты исследования ускорения для параллельного алгоритма.

При отображении параллельного алгоритма на многопроцессорную вычислительную систему будем придерживаться следующей стратегии: с увеличением числа процессоров параметры алгоритма изменяются так, чтобы погрешность вычислений уменьшалась.

Перечислим параметры вероятностной модели и реализующего ее параллельного алгоритма:  $\xi = \xi(\bar{p}, N_0, \Delta t, \rho, M, \{\hat{\Omega}_m\}_{m=1}^M)$ , где  $\bar{p}$  – множество параметров уравнения коагуляции и функционала  $\varphi_i$ .

Назовем **относительным ускорением** параллельного алгоритма функцию  $\Phi = C(\zeta_i)|_{M=1}/C(\zeta_i)|_{M>1}$ , где  $C(\zeta_i) = t_1 \varepsilon_{det}^{-2} D\zeta_i$  ( $t_1$  – среднее время моделирования одной реализации,  $\varepsilon_{det}$  – величина детерминированной погрешности оценки функционалов). При этом значения параметров  $\bar{p}, N_0, \Delta t, \rho$  одинаковы для случаев  $M = 1$  и  $M > 1$ . В предположении слабой зависимости величины  $\varepsilon_{det}$  от  $M$  получим, что  $\Phi = t_1|_{M=1}/t_1|_{M>1}$ .

Рассмотрим нелинейную зависимость величины начального числа частиц  $N_0$  от числа процессоров  $M$ :  $N_0 \sim M^d$ ,  $0 \leq d \leq 1$ .

Показано, что асимптотическая связь между параметрами  $N_0, \Delta t, \rho$  будет следующей:  $\Delta t \sim N_0^{-1}, \rho \sim N_0^{-1}$ .

Функция  $t_1$  разлагается в сумму слагаемых  $t_1 = E(t^{(i)} + t^{(c)} + t^{(e)})$ , где  $t^{(i)}$  – затраты на моделирование начального распределения частиц,  $t^{(c)}$  – затраты на независимое моделирование коагуляционных актов процессорами,  $t^{(e)}$  – затраты на обмен данными между процессорами. Для величин  $E t^{(i)}, E t^{(c)}, E t^{(e)}$  получены оценки по порядку величины:  $E t^{(i)} \sim C_i N_0$ ,  $E t^{(c)} \sim N_0 M^{-1} (C_f (M\rho)^{-1} + C_r)$ ,  $E t^{(e)} \sim C_e N_0 M^r$ ,  $r \geq 0$ , ( $C_i, C_f, C_r, C_e$  – константы).

Делаются теоретические выводы об асимптотическом поведении величины относительного ускорения  $\Phi$  при  $M \rightarrow \infty$ :

- если  $C_e = 0$ , то  $\Phi \sim M^d \rightarrow \infty$ ;
- если  $C_e > 0$ ,  $d < r$ , то  $\Phi \sim M^{d-r} \rightarrow 0$ ;
- если  $C_e > 0$ ,  $d = r$ , то  $\Phi \sim \text{const}$ ;
- если  $C_e > 0$ ,  $d > r$ , то  $\Phi \sim M^{d-r} \rightarrow \infty$ .

Случай  $C_e = 0$  соответствует отсутствию обмена частицами между процессорами,  $C_e > 0$  – наличию такого обмена. Приведенные соотношения полезны при оценке масштабируемости параллельного алгоритма, а также при выборе его параметров для конкретной вычислительной системы при заданном числе процессоров.

В п. 3.5 описываются результаты верификации теоретических выводов с использованием распределенных вычислений.

В расчетах на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН применялись раз-



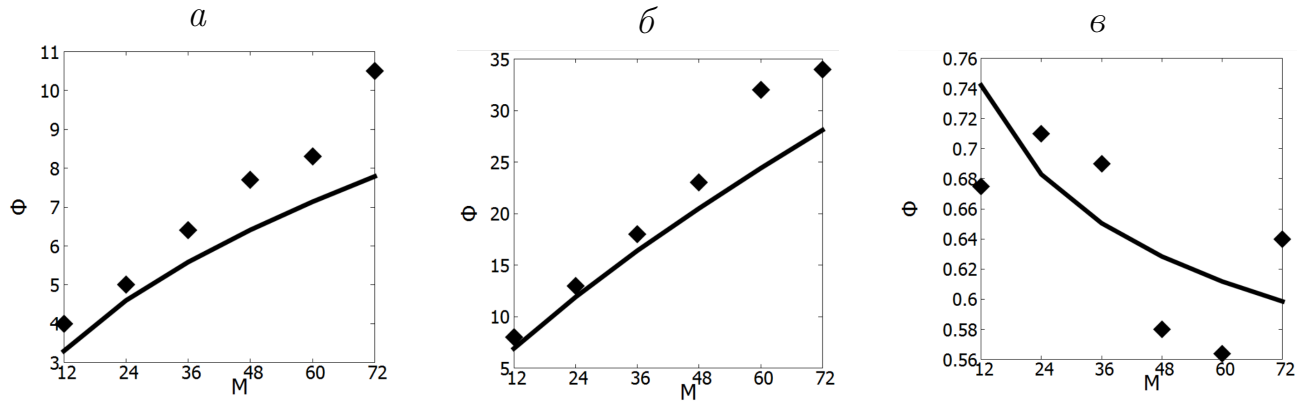


Рис. 2. Зависимость величины относительного ускорения  $\Phi$  от числа процессоров  $M$  для случаев  $d = 0.7$  (а);  $d = 1.0$  (б);  $d = 0.1$  (в) (сплошная линия – теоретическая оценка, ромбики – результаты расчетов)

работанные в диссертации программа COAGULATION-MS и библиотека PARMONS, что обеспечило возможность эффективного анализа ускорения от распараллеливания при изменении параметров  $N_0, \Delta t, \rho, M$  и процессорных областей  $\{\hat{\Omega}_m\}_{m=1}^M$ .

При проверке приведенных выше теоретических выводов решалась модельная задача для уравнения коагуляции. Область  $\Omega$  является цилиндром, ось которого параллельна оси OX; ядро коагуляции  $K(i, j, \bar{x}) \equiv 1$  для всех  $\bar{x} \in \Omega$ ; поле скоростей направлено вдоль оси OX и не зависит от  $i$ :  $\bar{v}_i(\bar{x}) \equiv (v_x(\bar{x}), 0, 0)$ ; начальная концентрация частиц  $c_1^{(0)}(\bar{x}) = 1$  для всех  $\bar{x} \in \Omega$ ,  $c_i^{(0)}(\bar{x}) \equiv 0$  ( $i = 2, \dots$ ) для всех  $\bar{x} \in \Omega$ ; граничные значения на основаниях цилиндра являются периодическими:  $c_i(t, \bar{x}_1) = c_i(t, \bar{x}_2)$  ( $i = 1, 2, \dots$ ),  $\bar{x}_1 = (0, y, z)$ ,  $\bar{x}_2 = (L, y, z)$ . Для такой задачи известны точные значения функционалов, что позволяет контролировать детерминированную погрешность оценок функционалов.

В специальных расчетах показано, что в оценке  $Et^{(e)} \sim C_e N_0 M^r$  значение  $r \approx 0.22$ . Для разных значений параметра  $d$  в формуле  $N_0 \sim M^d$  проводились расчеты на 12, 24, 36, 48, 60 и 72 процессорах. Цилиндр делился на процессорные области (слои) одинаковой толщины перпендикулярно оси OX. Достигнутый уровень погрешности оценки функционалов (детерминированной и статистической) составил менее 10 %.

На рис. 2 приведены результаты численных экспериментов, подтверждающие сделанные выше теоретические выводы о поведении относительного ускорения при увеличении числа процессоров.

**В главе 4** представлены методы численного статистического моделирования процесса переноса заряженных частиц с использованием распределенных вычислений.

**В п. 4.1** предложена вероятностная модель для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе на основе рассмотрения ветвящегося процесса, траектории которого представляют заряженные частицы.

Рассматривается открытая система с внешним электрическим полем, напряженность которого  $E = (0, 0, -E_z)$  считается постоянной; пространство заполнено азотом с концентрацией  $N$  и давлением  $p$ ; расстояние между катодом и анодом равно  $d$ . В ходе моделирования с катода из точки  $r = (x, y, z) = (0, 0, 0)$  в момент времени  $t = 0$  происходит эмиссия  $n_0$  электронов с нулевыми энергиями. Траектории движения каждого из электронов прослеживаются до достижения времени  $t_{max}$  или расстояния  $d$ ; с этой целью делаются одинаковые шаги по времени  $\Delta t$ .

При моделировании траектории ветвящегося процесса за один шаг по времени электрон с энергией  $T_{i-1}$  перемещается из точки  $r_{i-1}$  в точку  $r_i$  ( $i$  – номер шага), а его координата и скорость  $V_i = (V_x, V_y, V_z)$  изменяются следующим образом:  $r_i = r_{i-1} + V_{i-1}\Delta t - eE(\Delta t)^2/(2m_0)$ ,  $V_i = V_{i-1} - eE\Delta t/m_0$  ( $e$  – заряд электрона,  $m_0$  – его масса).

В конце каждого временного шага разыгрывается столкновение с вероятностью  $P = 1 - \exp(-\sigma_{tot}(T_i)N\Delta\ell)$ , где  $\sigma_{tot}$  – полное микроскопическое сечение взаимодействий,  $\Delta\ell = |r_i - r_{i-1}|$ . Затем разыгрывается тип взаимодействия в соответствии с сечениями упругого рассеяния, возбуждения и ионизации; для этого используются сечения 24 типов взаимодействий, известные для азота из литературы:

- упругое рассеяние не меняет энергию частицы, а направление движения моделируется согласно дифференциальным сечениям;
- для всех видов возбуждения энергия уменьшается на величину потенциала возбуждения, а направление движения разыгрывается также, как для упругого рассеяния;
- при ионизации энергия налетающего электрона  $T$  сначала уменьшается на величину потенциала ионизации  $T_{bd}$ , а затем остаток делится между двумя вылетающими электронами:  $T^{(1)} = T_1 + T_2$ ,  $T_1 = T - \omega T_{bd}$ ,  $T_2 = (\omega - 1)T_{bd}$  ( $\omega$  – доля переданной энергии); из законов сохранения импульса и энергии получаются направления движения электронов, образующихся в результате ионизации.

В ходе моделирования в определенные моменты времени  $t_i$  ( $i = 1, \dots, K$ ) вычисляется ряд функционалов на траектории ветвящегося процесса: число частиц, положение и скорость центра масс, средняя скорость и кинетическая энергия, коэффициенты продольной и поперечной диффузии, частота ионизации, коэффициент ударной ионизации и др.

В п. 4.2 представлены особенности моделирования элементов траектории ветвящегося процесса и выбор параметров алгоритма. Для вычисления вероятности столкновения на каждом временном шаге разработан экономичный алгоритм поиска соответствующих сечений в массиве для заданной энергии  $T_i$ . Для моделирования упругого рассеяния предлагаются эффективные способы,

Таблица 1. Сравнение двух способов распараллеливания для двух значений  $t_{max}$

$t_{max}$	$4 \cdot 10^{-11}$ нс	$6 \cdot 10^{-11}$ нс
$\langle n(t_{max}) \rangle$	$\approx 3.3 \cdot 10^4$	$\approx 5.1 \cdot 10^6$
$t_1$	37.2 с	5697.1 с
$t_1^{(comb)}$	8.3 с	1291.3 с

сочетающие использование экспериментальных данных и аналитических формул. При моделировании ионизации для вычисления доли переданной энергии  $\omega$  используется эффективный алгоритм дискретной суперпозиции.

Для заданной относительной погрешности вычисления функционалов  $\varepsilon$  величина шага времени  $\Delta t$  оценивается по формуле  $\Delta t \approx \varepsilon (\max_{T_i} (\sigma_{tot}(T_i) V_i) N)^{-1}$ , где максимум берется по всем возможным энергиям и вычисляется по таблицам сечений. Проверка формулы осуществлялась путем коррелированных расчетов с использованием разработанной в диссертации библиотеки PARMONC.

В п. 4.3 предлагается параллельный алгоритм, реализующий вероятностную модель процесса развития лавин.

Обсуждаются способы моделирования деревьев частиц, поясняются соответствующие вычислительные трудности. Рассматриваются три способа параллельного моделирования реализаций лавины (траектории ветвящегося процесса): крупноблочный, мелкоблочный и комбинированный. Для мелкоблочного и комбинированного способов выводятся формулы ускорения от распараллеливания; обсуждаются вопросы эффективного применения разработанных методов.

В тестовых расчетах на гибридной вычислительной системе с сопроцессорами Intel Xeon Phi (кластер МВС-10П в МСЦ РАН) сравнивались крупноблочный и комбинированный способы распараллеливания; в расчетах использовались разработанные в диссертации библиотека PARMONC и параллельная программа ELSHOW. В табл. 1 представлены данные расчетов для двух значений  $t_{max}$ ; приводится среднее число частиц в лавине к моменту времени  $t_{max}$ ; среднее время моделирования одной реализации:  $t_1$  – для крупноблочной методики распараллеливания,  $t_1^{(comb)}$  – для комбинированной. Как видно из табл. 1, для всех величин  $t_{max}$  в течение заданного машинного времени при использовании методики комбинированного распараллеливания по сравнению с крупноблочной можно смоделировать примерно в 4.4 раза большее число реализаций, таким образом, трудоемкость моделирования уменьшилась в 4.4 раза.

В п. 4.4 приводятся результаты верификации вероятностной модели. В расчетах на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН применялись разработанные в диссертации параллельная программа ELSHOW и библиотека PARMONC, что обеспечило возможность эффективного проведения коррелированных расчетов для различных значений параметров  $\Delta t, t_{max}, E_z/p$ .

В проведенных расчетах уровень статистической погрешности оценки функ-

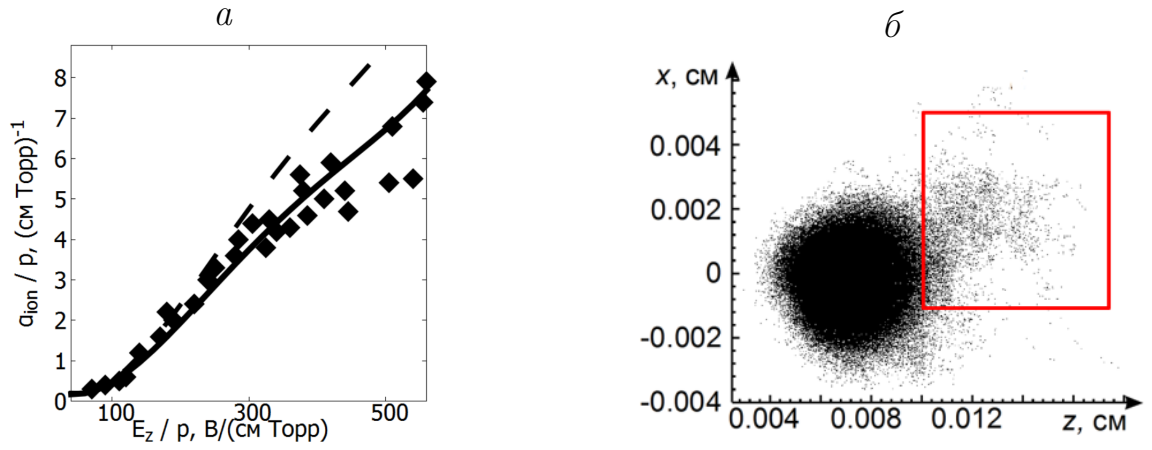


Рис. 3. Результаты расчетов: *a* – сравнение зависимости приведенного коэффициента ударной ионизации  $\alpha_{ion}/p$  от  $E_z/p$ : сплошная линия – результаты расчетов с помощью программы ELSHOW; пунктирная линия – результаты расчетов с использованием программы BOLSIG+; ромбы – экспериментальные данные; *б* – моделирование убегающих электронов: сечение реализации электронной лавины в плоскости XZ при  $E_z/p = 500$  В/(см Торр)

ционалов составил менее 2.6 %. Продемонстрировано хорошее совпадение результатов расчетов с известными экспериментальными данными, а также с данными расчетов с использованием программы BOLSIG+ (описана в работе G. Hagelaar, L.C. Pitchford, 2005) (см. рис. 3, *a*).

Показано, что при численном статистическом моделировании лавины увеличение величины напряжения приводит к образованию наблюдаемых в эксперименте «хвостов» высокоэнергетичных (убегающих) электронов (выделены прямоугольником на рис. 3, *б*).

В главе 5 представлены параллельные генераторы псевдослучайных чисел, методика распределенного численного статистического моделирования и имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах.

В п. 5.1 описывается распределительный способ получения псевдослучайных чисел. Для моделирования их базовой последовательности предлагается использовать следующий 128-битный конгруэнтный генератор (метод вычетов):

$$u_0 = 1, u_n \equiv u_{n-1}A \pmod{2^{128}}, A \equiv 5^{100109} \pmod{2^{128}}, \alpha_n = u_n 2^{-128}, n = 1, 2, \dots$$

Целесообразно определять различные подпоследовательности базовых псевдослучайных чисел для каждого вычислительного блока: вычислительного эксперимента, процессора (групп вычислительных ядер), реализации и ее элементов. Разделение базовой последовательности вначале производится для вычислительного эксперимента, затем полученные подпоследовательности разделяются для процессоров и т.д. Такой способ можно назвать **распределительным**, так как он особенно удобен для распределенных вычислений. В отличие от обычного способа распределения псевдослучайных чисел в порядке обраче-

ния к генератору, он обеспечивает малое изменение результатов моделирования при малом изменении параметров задачи, улучшая параметрический анализ результатов.

Для заданной длины подпоследовательностей  $\mu$  их начальные значения  $u_{k\mu}$  получаются по формуле  $u_{(k+1)\mu} \equiv u_{k\mu} A^\mu \pmod{2^{128}}$ ,  $k = 0, 1, \dots$ . Таким образом, для реализации  $k$ -го вычислительного блока используется подпоследовательность, начинающаяся с  $\alpha_{km} = u_{km} 2^{-128}$ .

При распределении псевдослучайных чисел необходимо учитывать тип используемой вычислительной системы и особенности моделирования релизаций, а именно, выделяются следующие варианты:

- массивно-параллельные вычислительные системы для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо на разных процессорах (вычислительных ядрах);
- массивно-параллельные вычислительные системы для случая, когда моделирование каждой реализации осуществляется совместно на нескольких процессорах (вычислительных ядрах);
- гибридные вычислительные системы для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо как на вычислительных ядрах основного процессора, так и сопроцессора;
- гибридные вычислительные системы для случая, когда моделирование каждой реализации осуществляется совместно на вычислительных ядрах основного процессора и сопроцессора.

Здесь под массивно-параллельной вычислительной системой понимается однородная система с распределенной памятью, причем у каждого процессора (вычислительного ядра) – своя оперативная память; процессоры при этом обычно объединены в вычислительные узлы. Под гибридной вычислительной системой понимается система, состоящая из вычислительных узлов, на каждом из которых расположены основные процессоры и многоядерные сопроцессоры.

Предлагаемый распределительный способ реализован в программном комплексе параллельных генераторов PARGENER-MS.

Кроме того, обсуждается возможность комбинирования псевдослучайных последовательностей с физическими генераторами случайных чисел.

В п. 5.2 приводятся результаты тестирования и сравнительного анализа предлагаемого параллельного генератора псевдослучайных чисел.

С целью проверки параллельного генератора были реализованы тесты  $n$ -мерной равномерности для выборок, которые были получены объединением начальных чисел из заданных подпоследовательностей. Многомерные распределения проверялись на равномерность в  $n$ -мерном кубе ( $n = 1, 2, \dots, 8$ ) по критерию  $\chi^2$ . Показано, что во всех случаях полученные значения статистики  $\tilde{\chi}^2$  не являются значимыми и тестирование прошло успешно.

Путем решения тестовых задач проверялась статистическая эквивалент-

ность разработанного параллельного генератора и а) конгруэнтного генератора с параметрами  $r = 40$ ,  $A = 5^{17}$ ; б) параллельного генератора МТ2203 из библиотеки Intel MKL. Были успешно проверены гипотезы о равенстве математических ожиданий для случайных оценок ряда функционалов (в том числе таких, для которых известно точное значение), получаемых независимо с использованием разработанного параллельного генератора и упомянутых генераторов. В расчетах на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН показано, что разработанный параллельный генератор сравним с библиотечным генератором МТ2203 по затратам машинного времени на решение поставленных задач.

**В п. 5.3** описывается методика распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем. Она состоит в организации моделирования независимых реализаций и вычисления выборочных средних на процессорах-вычислителях с периодической передачей результатов на центральный процессор-сборщик для последующего осреднения по формуле  $\bar{\zeta}_M = \sum_{m=0}^{M-1} l_m \bar{\zeta}^{(m)} / \sum_{m=0}^{M-1} l_m$ , где  $l_m$  – объем выборки, соответствующий  $m$ -му процессору-вычислителю,  $\bar{\zeta}^{(m)}$  – соответствующее выборочное среднее.

При распределенных вычислениях для каждого процессора псевдослучайные числа выбираются из непересекающихся подпоследовательностей базовой последовательности. Вычисления можно проводить на разных по производительности процессорах, не одновременно, допуская различные объемы выборок на них, используя результаты ранее проведенных вычислений при осреднении с новыми по приведенной выше формуле.

**В п. 5.4** описываются типичные приложения распределенного численного статистического моделирования. Рассматриваются вопросы эффективной оценки функционалов, зависящих от параметра. Описывается способ согласования параметров расчетов для глобальной оценки функции  $\varphi(x) = \int_Y g(x, y)P(dy)$  в ограниченной области путем оценивания ее значений в узлах сетки методом численного статистического моделирования и последующим осуществлением какого-либо восполнения. Рассматриваются также рандомизированные оценки вероятностных моментов решения уравнения  $L\phi = f$ , которые реализуются на основе моделирования некоторого случайного процесса, при этом оператор  $L$  и функция  $f$  зависят от случайного поля.

**В п. 5.5** обсуждается организация связей между процессорами. Рассматриваются две схемы: **схема 1** с одним центральным процессором-сборщиком, на который процессоры-вычислители периодически отправляют результаты; **схема 2** с дополнительными процессорами-сборщиками, связанными с центральным; при этом процессоры-вычислители поделены на группы, каждая из которых связана с соответствующим дополнительным процессором-сборщиком.

**В п. 5.6** описывается имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах и приводятся результаты оценки масштабируемости конкретной программы. Имитационная модель разработана на основе мульти-агентного подхода с учетом архитектуры используемой вычислительной системы. Исходные данные для калибровки модели рекомендуется получать с применением разработанной в диссертации библиотеки PARMONC.

Было проведено исследование масштабируемости параллельной программы для решения конкретной задачи динамики разреженных газов (работа М.С. Иванова и С.В. Рогазинского, 1988). В имитационной модели учитывалась архитектура кластера НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН. Исследовалось зависимость от общего числа процессоров  $M$  величины ускорения от распараллеливания  $S_L(M, M_1, M_{min}) = T_L(M_{min}, M_1)/T_L(M, M_1)$ , где  $L$  – общее число реализаций, полученных совокупно на всех процессорах,  $M_1$  – число дополнительных процессоров-сборщиков,  $T_L(M, M_1)$  – машинное время на центральном процессоре-сборщике, затраченное на получение и сохранение результатов,  $M_{min}$  – наименьшее число процессоров, использованных при расчетах.

Показано, что в схеме 2 для  $M \sim 10^5 \div 10^6$  при увеличении  $M_1$  зависимость  $S_L$  от  $M$  становится ближе к «идеальной» ( $S_L(M) = M$ ), в то время как схема 1 практически неэффективна. На рис. 4 а, б приведены оценки поведения ускорения  $S_L$  с помощью имитационного моделирования: для каждого  $M_1 = 10, 20, 100$  процессоры-вычислители делились на соответствующее число групп; при фиксированных значениях  $M_1$  рассматривались  $M = 10^5, 5 \cdot 10^5$  моделируемых процессоров.

Для рассматриваемой задачи ставился вопрос о максимальном значении ускорения  $S_L$  в зависимости от  $M_1$ . С этой целью в имитационной модели при фиксированном значении  $M = 10^6$  варьировалось значение  $M_1$ , а также соответствующее число процессоров-вычислителей в каждой группе, связанной со своим процессором-сборщиком. На рис. 4, в показана зависимость  $S_L$  от  $M_1$ ; делается вывод, что оптимальное значение  $M_1 \approx 1000$ .

**В главе 6** представлены библиотеки PARMONC, PARMONC-PC, MONC для реализации распределенного численного статистического моделирования и параллельная программа AMIKS для численного анализа стохастических осцилляторов.

**В п. 6.1** представлена библиотека PARMONC для высокопроизводительных вычислительных систем. Библиотека представляет собой удобный программный инструмент для реализации распределенного численного статистического моделирования на массивно-параллельных и гибридных суперкомпьютерных кластерах. В библиотеке используются представленные в гл. 5 параллельные генераторы псевдослучайных чисел и методика распределенных вычислений.

С помощью библиотеки возможно коррелирование результатов разных вы-

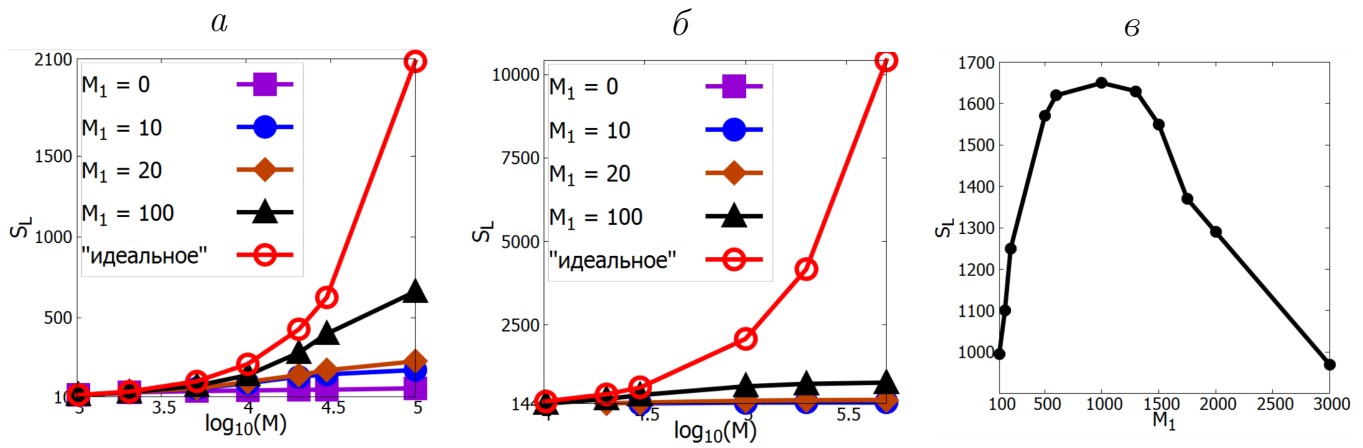


Рис. 4. Зависимость ускорения  $S_L$  от общего числа моделируемых процессоров  $M$  при разном числе процессоров-сборщиков  $M_1$ :  $M = 10^5$  (а);  $M = 5 \cdot 10^5$  (б); случай  $M_1 = 0$  соответствует схеме 1; в – зависимость ускорения  $S_L$  от числа дополнительных процессоров-сборщиков  $M_1$  при фиксированном числе моделируемых процессоров  $M = 10^6$

числительных экспериментов с целью параметрического анализа реализуемых вероятностных моделей, возобновление ранее остановленных вычислительных экспериментов с автоматическим учетом их результатов. В расчетах можно использовать процессоры с разной производительностью. На центральном процессоре-сборщике осуществляется периодическое сохранение результатов, в частности значений статистической погрешности оценок функционалов.

Предложена стандартная методология создания программ распределенного численного статистического моделирования с использованием библиотеки PARMONC для различных архитектур вычислительных систем.

В п. 6.2 представлена библиотека PARMONC-PC для персональных компьютеров с многоядерными процессорами. Эксплуатация библиотеки возможна с одновременным использованием центрального процессора и ускорителя Intel Xeon Phi. В библиотеке реализованы функции и процедуры, соответствующие по назначению аналогичным функциям библиотеки PARMONC.

В п. 6.3 представлена библиотека MONC, предназначенная для запуска программ распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных грид-системах, состоящих из персональных компьютеров с современными процессорами и сопроцессорами.

Пользователь создает последовательную программу с соблюдением определенных правил, предоставляя для библиотеки исполняемый файл; предполагается, что в программе используется предложенный в гл. 5 параллельный генератор псевдослучайных чисел. С помощью библиотеки возможно коррелирование результатов разных вычислительных экспериментов с целью параметрического анализа реализуемых вероятностных моделей.

Предлагается также методика совместного применения библиотек MONC и PARMONC-PC: исполняемый файл подготавливается с использованием библиоте-



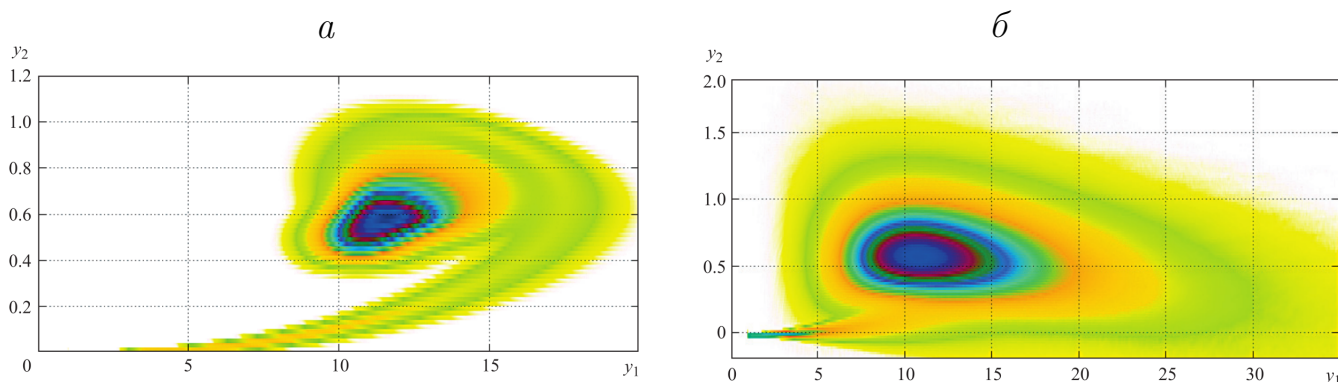


Рис. 5. Пример численного анализа стохастического осциллятора с помощью программы AMIKS [33]: графики частотных фазовых портретов двух компонент СДУ для модели продольного движения стабилизированной по крену ракеты в зависимости от величины интенсивности внешних случайных шумов, *a* – шумы меньшей интенсивности, *б* – большей

ки PARMONC-PC; распределенные расчеты реализуются с помощью библиотеки MONC.

В п. 6.4 представлена параллельная программа AMIKS для численного анализа стохастических осцилляторов на высокопроизводительных вычислительных системах.

Программа представляет собой удобный программный инструмент для численного анализа (в том числе параметрического) решений систем СДУ большой размерности, описывающих различные модели стохастических осцилляторов: линейных и нелинейных колебательных контуров, движения космических аппаратов, автоколебательных режимов в химических реакциях, движения заряженных частиц в электромагнитном поле, турбулентного движения жидкости и газа и др.

В программе рассчитываются различные динамические характеристики стохастических осцилляторов, включая частотный фазовый портрет и частотную интегральную кривую компонент решения СДУ.

Одним из модулей программы является библиотека PARMONC.

На рис. 5 показан пример численного анализа стохастического осциллятора с помощью программы AMIKS: приведены графики частотных фазовых портретов двух компонент СДУ для модели продольного движения стабилизированной по крену ракеты в зависимости от величины интенсивности внешних случайных шумов (*a* – шумы меньшей интенсивности, *б* – большей) [33].

В **Заключении** представлены основные результаты работы и перспективы дальнейшей разработки темы диссертации.

В **Приложении 1** приводится описание разработанных параллельных вычислительных программ, библиотек и программного комплекса: п. 1 – для программы BOUNDARY-PC; п. 2 – для программы CONCENTRATION-PC; п. 3 – для программы COAGULATION-PC; п. 4 – для программы ELSHOW; п. 5 – для програм-

мы AMIKS; п. 6 – для библиотеки PARMONC; п. 7 – для библиотеки PARMONC-PC; п. 8 – для библиотеки MONC; п. 9 – для программного комплекса PARGENER-MS.

В **Приложении 2** представлены копии и рефераты полученных свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

В **Приложении 3** приводятся копии актов о внедрении научных и практических результатов диссертации, а также диплома лауреата конкурса прикладных разработок и исследований в области компьютерных технологий.

## **Заключение**

В диссертации получены следующие основные результаты:

- 1) разработаны и исследованы эффективные алгоритмы распределенного численного статистического моделирования на основе методов расщепления и весового моделирования для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов, таких как вероятность недостижения границы области траекториями за заданное время и полная концентрация траекторий в точке за заданное время;
- 2) разработаны и исследованы вероятностная модель для численного моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции, основанная на применении пространственной регуляризации ядра коагуляции и метода мажорантной частоты, и реализующий ее параллельный алгоритм;
- 3) разработаны и исследованы вероятностная модель для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе, основанная на использовании ветвящихся процессов, и реализующий ее параллельный алгоритм;
- 4) разработаны и исследованы длиннопериодные параллельные генераторы псевдослучайных чисел и методика распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем;
- 5) разработана имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования с целью получения оценок их масштабируемости на большое число процессоров;
- 6) разработаны универсальные библиотеки распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем и параллельные прикладные программы для решения задач диффузии, коагуляции, переноса заряженных частиц и численного анализа стохастических осцилляторов.

## Публикации в журналах из списка ВАК

1. Marchenko M.A. Calculation optimization in the solution of diffusion problem // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2001. Vol. 16, № 6. P. 483–496.
2. Михайлов Г.А., Марченко М.А. Использование выборки по важности при решении стохастических дифференциальных уравнений // Доклады Академии наук. 2001. Т. 380, № 2. С. 164–167.
3. Marchenko M.A., Mikhailov G.A. Parallel realization of statistical simulation and random number generators // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2002. Vol. 17, № 1. P. 113–124.
4. Марченко М.А., Михайлов Г.А. Весовые алгоритмы статистического моделирования диффузионных процессов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2003. Т. 43, № 4. С. 571–584.
5. Марченко М.А. Комплекс программ MONC для распределенных вычислений методом Монте-Карло // Сибирский журнал вычислительной математики. 2004. Т. 7, № 1. С. 43–55.
6. Марченко М.А. Статистическое моделирование пространственно неоднородной коагуляции с учетом диффузионного переноса частиц // Сибирский журнал вычислительной математики. 2005. Т. 8, № 3. С. 245–258.
7. Marchenko M.A. Majorant frequency principle for an approximate solution of a nonlinear spatially inhomogeneous coagulation equation by the Monte Carlo method // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2006. Vol. 21, № 3. P. 199–218.
8. Марченко М.А., Михайлов Г.А. Распределенные вычисления по методу Монте-Карло // Автоматика и телемеханика. 2007. № 5. С. 157–170.
9. Marchenko M.A. Parallel Pseudorandom Number Generator for Large-scale Monte Carlo Simulations // Lecture Notes in Computer Science. 2007. Vol. 4671. P. 276–282.
10. Marchenko M.A. A study of a parallel statistical modelling algorithm for solution of the nonlinear coagulation equation // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2008. Vol. 23, № 6. P. 597–613.
11. Marchenko M.A. Efficiency of Parallel Monte Carlo Method to Solve Nonlinear Coagulation Equation // Lecture Notes in Computer Science. 2009. Vol. 5698. P. 133–141.
12. Marchenko M.A. PARMONC – A Software Library for Massively Parallel Stochastic Simulation // Lecture Notes in Computer Science. 2011. Vol. 6873. P. 302–315.
13. Марченко М.А. Библиотека PARMONC для решения «больших» задач по методу Монте-Карло // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2012. № 5. С. 392–397.
14. Глинский Б.М., Родионов А.С., Марченко М.А., Подкорытов Д.И., Винс

Д.В. Агентно-ориентированный подход к имитационному моделированию супер-ЭВМ экзафлопсной производительности в приложении к распределенному статистическому моделированию // Вестник Южно-Уральского государственного университета, сер.: «Математическое моделирование и программирование». 2012. Т. 12, № 18 (277). С. 94–99.

15. Марченко М.А. Эффективное использование многоядерных сопроцессоров при суперкомпьютерном статистическом моделировании электронных лавин // Вестник Южно-Уральского государственного университета, сер.: «Вычислительная математика и информатика». 2013. Т. 2, № 4. С. 80–93.

16. Глинский Б.М., Марченко М.А., Михайленко Б.Г., Родионов А.С., Черных И.Г., Караваев Д.А., Подкорытов Д.И., Винс Д.В. Отображения параллельных алгоритмов для суперкомпьютеров экзафлопсной производительности на основе имитационного моделирования // Информационные технологии и вычислительные системы. 2013. № 4. С. 3–14.

17. Глинский Б.М., Родионов А.С., Марченко М.А., Караваев Д.А., Подкорытов Д.И., Винс Д.В. Использование имитационного моделирования для настройки параметров масштабируемых алгоритмов при высокопроизводительных вычислениях // Вестник УГАТУ. 2013. Т. 17, № 5 (58). С. 200–209.

18. Лотова Г.З., Марченко М.А., Михайлов Г.А., Рогазинский С.В., Рыжов В.В., Ухинов С.А., Шкляев В.А. Параллельная реализация метода Монте-Карло для моделирования развития электронных лавин в газе // Известия высших учебных заведений. Физика. 2014. Т. 57, № 3-2. С. 182–185.

19. Lotova G.Z., Marchenko M.A., Mikhailov G.A., Rogazinskii S.V., Ukhinov S.V., Shklyayev V.A. Numerical statistical modelling algorithms for electron avalanches in gases // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2014. Vol. 29, № 4. P. 251–263.

### **Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ**

20. Свидетельство № 2016617366 РФ. BOUNDARY-МС – программа для прецизионной оценки вероятности недостижения границы области траекториями многомерного диффузионного процесса по методу Монте-Карло на массивно-параллельных вычислительных системах: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ / Марченко М.А.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 01.07.2016 г.

21. Свидетельство № 2016615259 РФ. CONCENTRATION-МС – программа для прецизионной оценки полной концентрации траекторий диффузионного процесса в точке по методу Монте-Карло на массивно-параллельных вычислительных системах: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ / Марченко М.А.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 19.05.2016 г.

22. Свидетельство № 2016615132 РФ. COAGULATION-МС – программа для численного статистического моделирования процесса пространственно неод-

народной коагуляции на массивно-параллельных вычислительных системах: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ / Марченко М.А.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 17.05.2016 г.

23. Свидетельство № 2016616477 РФ. ELSHOW – программа для численного статистического моделирования процесса развития электронных лавин в газе на массивно-параллельных вычислительных системах: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ / Лотова Г.З., Рогазинский С.В., Марченко М.А.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 14.06.2016 г.

24. Свидетельство № 2016617281 РФ. PARGENER-МС – программный комплекс параллельных генераторов псевдослучайных чисел для реализации технологии распределенного численного статистического моделирования: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ / Марченко М.А.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 29.06.2016 г.

25. Свидетельство № 2016616687 РФ. PARMONC – библиотека для реализации технологии распределенного численного статистического моделирования на массивно-параллельных вычислительных системах: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ / Марченко М.А.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 17.06.2016 г.

26. Свидетельство № 2016616381 РФ. PARMONC-PC – библиотека для реализации технологии распределенного численного статистического моделирования на персональных компьютерах: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ / Марченко М.А.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 09.06.2016 г.

27. Свидетельство № 2016617282 РФ. MONC – библиотека для реализации технологии распределенного численного статистического моделирования на грид-системах: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ / Марченко М.А.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 29.06.2016 г.

28. Свидетельство № 2016616439 РФ. AMIKS – программа для численного анализа стохастических осцилляторов на массивно-параллельных вычислительных системах: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ / Артемьев С.С., Марченко М.А., Иванов А.А., Корнеев В.Д., Смирнов Д.Д.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 10.06.2016 г.

### **Публикации в изданиях, индексируемых в Scopus и Web of Science**

29. Marchenko M., Adami D., Callegari C., Giordano S., Pagano M. Design and Deployment of a Network-aware Grid for e-Science Applications // Proc. of IEEE International Conference on Communications. Dresden, Germany. 2009. P. 1–5.

30. Glinsky B., Rodionov A., Marchenko M., Podkorytov D., Weins D. Scaling the Distributed Stochastic Simulation to Exaflop Supercomputers // Proc. of the 14th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC-2012). 2012. P. 1131–1136

31. Rogasinsky S.V., Marchenko M.A. Stochastic Simulation of Electron Avalan-

ches on Supercomputer // AIP Conference Proceedings. 2014. Vol. 1628, № 1. P. 1116–1123.

32. Marchenko M. Efficient Computational Approaches for Parallel Stochastic Simulation on Supercomputers // Parallel Programming: Practical Aspects, Models and Current Limitations. New York: Nova Science Publishers, 2014. P. 117–142.

### **Другие публикации по теме диссертации**

33. Артемьев С.С., Марченко М.А., Корнеев В.Д., Якунин М.А., Иванов А.А., Смирнов Д.Д. Анализ стохастических колебаний методом Монте-Карло на суперкомпьютерах. Новосибирск: Издательство СО РАН, 2016. 294 с. ISBN: 978-5-7692-1499-8.

34. Разработка экономичных методов Монте-Карло для решения нелинейного уравнения пространственно неоднородной коагуляции : отчет о НИР (заключ.) : Тема № 06-01-00586 (РФФИ). / рук. работы Марченко М.А.; исполн.: А.И. Левыкин и др. [Электрон. ресурс]. URL: <http://elibrary.ru/item.asp?id=25784972> (дата обращения 31.08.2016).

35. Разработка, оптимизация и адаптация к параллельным ЭВМ методов Монте-Карло для решения нелинейного уравнения коагуляции и других задач математической физики : отчет о НИР (заключ.) : Тема № 09-01-00639 (РФФИ). / рук. работы Марченко М.А.; исполн.: А.И. Левыкин и др. [Электрон. ресурс]. URL: <http://elibrary.ru/item.asp?id=25886741> (дата обращения 31.08.2016).

36. Разработка и исследование масштабируемых параллельных алгоритмов статистического моделирования для решения ряда задач естествознания и оценка эффективности их выполнения на перспективных экзафлопсных суперкомпьютерах : отчет о НИР (заключ.) : Тема № 12-01-00727 (РФФИ). / рук. работы Марченко М.А.; исполн.: С.В. Рогазинский и др. [Электрон. ресурс]. URL: <http://elibrary.ru/item.asp?id=25784986> (дата обращения 31.08.2016).

37. Marchenko M.A. Use of importance sampling in calculation of probability of boundary non-achievement // Proc. of the Forth St.Petersburg Workshop on Simulation. 2001. St.Petersburg. P. 338–342.

38. Marchenko M.A. Optimization and parallelization of statistical simulation of diffusion processes // Proc. of the International Conference on Computational Mathematics. Novosibirsk. 2002. P. 227–231.

39. Бурмистров А.В., Макаров Р.Н., Марченко М.А., Шкарупа Е.В. О решении диффузионных задач методом Монте-Карло // Материалы III конференции молодых ученых, посвященной М.А. Лаврентьеву. Часть I. Математика и информатика, механика и энергетика. Новосибирск. 2003. С. 8–11.

40. Marchenko M.A. Stochastic simulation of spatially inhomogeneous coagulation in one-dimensional premixed flame // Труды Международной конференции по вычислительной математике МКВМ-2004. Ч. 1. Novosibirsk. 2004. С. 347–351

41. Marchenko M.A. Stochastic simulation of spatially inhomogeneous coagulation // Proc. of the 5th St. Petersburg Workshop on Simulation. St. Petersburg. 2005. P. 461–464.
42. Марченко М.А. Распределенные вычисления по методу Монте-Карло с использованием GRID-технологий // Материалы IX Международной конференции «Проблемы функционирования информационных сетей». Новосибирск. 2006. С. 192–195.
43. Marchenko M.A. Efficient parallel Monte Carlo algorithm for modeling spatially inhomogeneous coagulation and its adaptation to GRID environment // Proc. of 7th International conference on Monte Carlo methods and Quasi-Monte Carlo methods in scientific computing. Ulm, Germany: 2006. P. 97.
44. Марченко М.А. Использование принципа мажорантной частоты для приближенного решения нелинейного уравнения пространственно-неоднородной коагуляции методом Монте-Карло // Сборник материалов научного семинара стипендиатов программ «Михаил Ломоносов». М.: 2006. С. 133–135.
45. Бурмистров А.В., Лукинов В.Л., Марченко М.А. Статистические методы решения линейных и нелинейных уравнений математической физики // Материалы V Конференции молодых ученых СО РАН, посвященной М.А. Лаврентьеву, Ч. I. «Математика и информатика, механика и энергетика, химические науки». Новосибирск: НГУ, 2007. С. 4–6.
46. Marchenko M.A. Efficiency of Monte Carlo method to solve nonlinear coagulation equation when implemented on parallel computers (including GRID infrastructure) // Вычислительные технологии. 2008. Т. 13, № 4, спец. выпуск С. 4–11.
47. Марченко М.А., Пагано М. Распределение ресурсов в сети DiffServ / MPLS при параллельном моделировании процесса коагуляции в системе грид // Материалы X Международной конференции «Проблемы функционирования информационных сетей». Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2008. С. 70–72.
48. Marchenko M., Adami D., Callegari C., Giordano S., Pagano M. A GRID network-aware for efficient parallel Monte Carlo simulation of coagulation phenomena // Proc. of INGRID-2008. Lacco Ameno, Island of Ischia, Italy. 2008. P. 1–19.
49. Marchenko M. Study of a parallel direct simulation Monte Carlo algorithm to solve coagulation equation // Proc. of the 6th St.Petersburg Workshop on Simulation. St. Petersburg. 2009. P. 149–154.
50. Марченко М.А. PARMONC – универсальная библиотека программ для распределенных расчетов по методу Монте-Карло // Материалы Международной конференции «Кубатурные формулы, методы Монте-Карло и их приложения». Красноярск: СФУ. 2011. С. 76.
51. Войтишек А.В., Марченко М.А., Шкарупа Е.В. Операция независимого суммирования как основа разработки алгоритмов, допускающих эффективное распараллеливание // Тезисы докладов Всероссийской конференции «Матема-

тическое моделирование и вычислительно-информационные технологии в междисциплинарных научных исследованиях». Иркутск: 2011. С. 34–35.

52. Глинский Б.М., Родионов А.С., Марченко М.А. Об агентно-ориентированном подходе к имитационному моделированию суперЭВМ экзафлопсной производительности // Труды Международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее». 2011. Новороссийск. С. 159–165.

53. Глинский Б.М., Родионов А.С., Марченко М.А., Караваев Д.А., Подкорытов Д.И., Винс Д.В. Исследование масштабируемости параллельных алгоритмов методом агентно-ориентированного моделирования // Труды Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии» (ПаВТ'2013). Новосибирск. 2013. С. 318–329.

54. Chernykh I., Glinskiy B., Kulikov I., Marchenko M., Rodionov A., Podkorytov D., Karavaev D. Using Simulation System AGNES for Modeling Execution of Parallel Algorithms on Supercomputers // Proc. of the 2014 International Conference on System, Control, Signal Processing and Informatics (SCSI'2014). 2014. P. 66–70.

55. Marchenko M.A. On application of splitting method for solving stochastic differential equations // Bulletin of the NCC. 1999. P. 74–82.

56. Михайлов Г.А., Марченко М.А. Параллельная реализация статистического моделирования и генераторов случайных чисел // Новосибирск. 2001 (Препринт ИВМиМГ СО РАН № 1154).

57. Марченко М.А. Использование принципа мажорантной частоты для приближенного решения нелинейного уравнения пространственно неоднородной коагуляции методом Монте Карло // Новосибирск. 2005. (Препринт ИВМиМГ СО РАН № 1161).

58. Марченко М.А. Исследование эффективности распараллеливания метода Монте-Карло для моделирования процесса коагуляции // Труды ИВМиМГ СО РАН. 2007. № 7. С. 75–80.

59. Марченко М.А. О решении нелинейных уравнений математической физики методом Монте-Карло // Труды ИВМиМГ СО РАН. 2008. № 8. С. 81–87.

60. Марченко М.А. Реализация масштабируемых алгоритмов распределенного статистического моделирования на суперкомпьютере с помощью программной библиотеки PARMONC // Проблемы информатики. 2013. № 2. С. 73–81.

61. Марченко М.А. Искровые разряды, электронные лавины, метод Монте-Карло и суперкомпьютеры // Суперкомпьютеры. 2014. № 17. С. 41–46.

62. Глинский Б.М., Марченко М.А., Родионов А.С., Караваев Д.А., Подкорытов Д.И. Отображения параллельных алгоритмов на суперкомпьютеры экзафлопсной производительности на основе имитационного моделирования // Машинное обучение и анализ данных. 2014. Т. 1, № 10. С. 1451–1465.

63. Марченко М.А. Численное статистическое моделирование стохастических колебаний на суперкомпьютерах // Суперкомпьютеры. 2015. № 21. С. 44–48.