

# Численное статистическое моделирование кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц с использованием распределённых вычислений

Диссертация на соискание учёной степени  
доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18  
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»  
по отрасли «физико-математические науки»

М.А. Марченко

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт вычислительной математики и математической геофизики  
Сибирского отделения Российской академии наук

16 июня 2016 г.

# План доклада

1. Введение.
2. Глава 1.
3. Глава 2.
4. Глава 3.
5. Глава 4.
6. Глава 5.
7. Глава 6.
8. Приложения.
9. Заключение.

# Введение

## Актуальность исследований

- Современное развитие многопроцессорной вычислительной техники, у которой число ядер исчисляется многими сотнями тысяч, выдвигает на первый план методы численного статистического моделирования, наиболее адаптированные к параллельным вычислениям по сравнению с другими численными алгоритмами с точки зрения простоты распараллеливания.
- Наибольшая эффективность использования методов численного статистического моделирования достигается при моделировании долговременных случайных процессов.
- Использование методов численного статистического моделирования особенно эффективно для параметрического анализа стохастических моделей, в том числе для решения прямых задач математической физики с учётом случайных параметров.

## Актуальность исследований

В работе [1]:

- отмечено, что новые технологии промышленного производства «всё в большей степени опираются не на реальные испытания разрабатываемого изделия (проекта), а на его виртуальное представление, моделирование возможных опытных ситуаций с целью выявления всей той информации, которую ранее давал реальный эксперимент»
- в числе приоритетов, учитывая возможное появление в ближайшей перспективе экзафлопсных супер-ЭВМ , называется разработка новых физико-математических моделей, численных методов, расчётных схем и методик, а также новых технологий создания прикладных программных систем,
- упоминается важность предсказания производительности суперкомпьютерных систем,
- затронут также актуальный вопрос создания отечественного системного и прикладного программного обеспечения («импортозамещения»)

[1] Бетелин В. Б. *Суперкомпьютерные технологии в России: состояние и проблемы развития // Вестник РАН. 2015. Т. 85, № 11*

## Объект исследований. Цели и задачи диссертации.

**Объектом исследований** диссертации являются вероятностные модели естественнонаучных явлений и реализующие их параллельные алгоритмы метода численного статистического моделирования, а также вычислительные программы и комплексы программ численного статистического моделирования.

**Основная цель диссертации** – разработка вероятностных моделей кинетических процессов, нацеленных на параллельную реализацию на высокопроизводительных вычислительных системах, а также методов численного параметрического анализа моделей, а именно:

1. создание и исследование адекватных вероятностных моделей и реализующих их экономичных параллельных алгоритмов численного статистического моделирования для решения ряда задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц;
2. разработка методики распределённого численного статистического моделирования и параллельных генераторов псевдослучайных чисел для высокопроизводительных вычислительных систем, пригодных для проведения параметрического анализа и реализации разных уровней распараллеливания;
3. создание стандартных пакетов программ для решения прикладных задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц и реализации распределённого численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах с различными архитектурами.

## Объект исследований

Используемый в диссертации термин **распределённые вычисления** понимается следующим образом [1]:

- Распределённые вычисления – это вычисления на **распределённых вычислительных системах**, компоненты которых располагаются на отдельных компьютерах (каждый – со своей оперативной памятью), соединённых сетью передач данных, и взаимодействуют между собой для достижения общей цели путём передачи сообщений.
- Суперкомпьютерный вычислительный кластер (с массивно-параллельной или гибридной архитектурой) может рассматриваться как распределённая вычислительная система (например, см. описание суперкомпьютерных систем на сайте TOP500).
- Вычислительная программа, запущенная на распределённой системе называется **распределённой программой**, а **распределённое программирование** – это процесс создания такой программы.
- В распределённых вычислениях исходная задача разбивается на множество подзадач, каждая из которых решается на одном или многих компьютерах, причём, возможно, в разное время.

Вывод: параллельное исполнение алгоритмов численного статистического моделирования является именно распределёнными вычислениями.

[1] *Coulouris G., Dollimore J., Kindberg T., Blair G. Distributed Systems: Concepts and Design (5th Edition). Pearson, 2011*

## Положения, выносимые на защиту

- **№1.** Разработаны эффективные параллельные алгоритмы численного статистического моделирования для реализации вероятностных моделей диффузии с целью прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов, а именно, вероятности недостижения границы области траекториями за заданное время и полной концентрации траекторий в точке, исследована эффективность алгоритмов в зависимости от их параметров.
- **№2.** Создана вероятностная модель пространственно неоднородной коагуляции, предложен реализующий её экономичный параллельный алгоритм метода прямого статистического моделирования, исследована эффективность параллельного алгоритма в зависимости от его параметров.
- **№3.** Предложена вероятностная модель процесса развития электронных лавин в газе на основе ветвящихся случайных процессов, представлен реализующий её экономичный параллельный алгоритм численного статистического моделирования, разработана эффективная модификация алгоритма для вычислительных систем с гибридной архитектурой, исследована эффективность параллельного алгоритма в зависимости от его параметров.



## Положения, выносимые на защиту

- **№4.** Разработана методика распределённого численного статистического моделирования для многопроцессорных вычислительных систем; предложены и исследованы длиннопериодные параллельные генераторы базовых псевдослучайных чисел, пригодные для проведения численного параметрического анализа вероятностных моделей и реализации разных уровней распараллеливания, с применением имитационного моделирования получены оценки масштабируемости программ численного статистического моделирования, на основе разработанных методов созданы универсальные библиотеки PARMONC, PARMONC-PC и MONC, а также программа AMIKS для численного анализа стохастических осцилляторов.

## Соответствие паспорту научной специальности

Содержание диссертации соответствует формуле специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» по отрасли «физико-математические науки» и следующим пунктам областей исследований:

- п.1 «разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений»,
- п.3 «разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий»,
- п.4 «реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента».

## Научная новизна

- Разработаны экономичные алгоритмы численного статистического моделирования для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов, а именно, вероятности недостижения границы области и полной концентрации траекторий в точке, проведено исследование эффективности алгоритмов в зависимости от их параметров, реализованы параллельные вычислительные программы BOUNDARY-MC и CONCENTRATION-MC;
- разработана вероятностная модель пространственно неоднородной коагуляции и реализующий её экономичный параллельный алгоритм метода прямого статистического моделирования, проведено исследование эффективности параллельного алгоритма в зависимости от его параметров, реализована параллельная вычислительная программа COAGULATION-MC;
- предложена вероятностная модель процесса развития электронных лавин в газе на основе ветвящихся случайных процессов и реализующий её экономичный параллельный алгоритм численного статистического моделирования для вычислительных систем с массивно-параллельной и гибридной архитектурой, проведено исследование эффективности параллельного алгоритма в зависимости от его параметров, реализована параллельная вычислительная программа ELSHOW;

## Научная новизна

- разработана и апробирована методика распределённого численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем;
- разработана методика оценки масштабируемости алгоритмов численного статистического моделирования с использованием технологии имитационного моделирования;
- предложены и исследованы быстродействующие длиннопериодные параллельные генераторы базовых псевдослучайных чисел для высокопроизводительных вычислительных систем, пригодные для проведения численного параметрического анализа вероятностных моделей и реализации разных уровней распараллеливания создан программный комплекс параллельных генераторов PARGENER-MS;
- предложена стандартная методология разработки программ распределённого численного статистического моделирования для различных архитектур высокопроизводительных вычислительных систем;

## Научная новизна

- разработаны универсальные библиотеки PARMONC и PARMONC-PC для исполнения программ распределённого численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах с массивно-параллельной и гибридной архитектурами;
- разработана универсальная библиотека MONC для исполнения программ распределённого численного статистического моделирования на высокопроизводительных грид-системах;
- разработана параллельная программа AMIKS для численного анализа стохастических осцилляторов на высокопроизводительных вычислительных системах.

## Теоретическая и практическая значимость

- Библиотека PARMONC внедрена в Центре коллективного пользования «Сибирский суперкомпьютерный центр» СО РАН (ЦКП ССКЦ СО РАН) и с 2012 г. применяется его пользователями для проведения расчётов по методу Монте-Карло на вычислительном кластере НКС-30Т.
- Библиотека PARMONC также использовалась в ходе выполнения научно-исследовательских работ по государственному контракту от 19.08.2011 г. №07.514.11.4016 в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России на 2007-2013 годы».

## Публикации

Материалы диссертации представлены в 63 печатных работах, свидетельствах о регистрации программ для ЭВМ и интернет-ресурсах.

Основные результаты диссертации в полном объёме содержатся в следующих публикациях (нумерация – из текста диссертации):

- 21 статья в журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий ВАК,
- 9 свидетельств о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Имеются также акты о внедрении научных и практических результатов диссертации.

## Структура диссертации

- Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, библиографии и трёх приложений.
- Общий объём диссертации – 325 страниц, в том числе:
  - текст введения и шести глав – 243 с.,
  - приложения и библиография – 82 с.
- Библиография включает 253 наименования на 32 страницах.
- Диссертация содержит 68 рисунков, 16 таблиц.



## Терминология

Пусть задано приближение функционала  $\varphi \in R$  математическим ожиданием случайной величины  $\zeta$ , которое оценивается выборочным средним по  $L$  независимым её **реализациям**:

$$\varphi \approx E\zeta \approx \bar{\zeta} = L^{-1} \sum \zeta^{(i)}$$

Величина  $|\varphi - E\zeta|$  называется **детерминированной погрешностью**. Случайную величину  $\zeta$  принято называть **случайной оценкой**. **Вероятностной моделью** будем называть алгоритм моделирования (имитации) случайного объекта, т.е. алгоритм получения реализаций случайной оценки  $\zeta$ .

Известно, что с вероятностью  $p$  выполняется соотношение

$$P(|\bar{\zeta} - E\zeta| \leq \gamma(p)\sqrt{D\zeta/L}) = p$$

Отсюда получим величину абсолютной **статистической погрешности**

$$\bar{\varepsilon} = \gamma(p)\sqrt{D\zeta/L}, \quad \gamma(p) = 3 \quad \text{для } p = 0.997.$$

Тогда, если задан верхний уровень погрешности  $\varepsilon$ , то необходимое число реализаций имеет следующий порядок:

$$L \sim D\zeta \varepsilon^{-2}$$

**Трудоемкость** статистического моделирования характеризуется величиной

$$C(\zeta) = \tau_{\zeta} L \sim \tau_{\zeta} D\zeta \varepsilon^{-2},$$

где  $\tau_{\zeta}$  – среднее машинное время, затраченное на получение значения  $\zeta$ .

## Глава 1

Актуальные задачи и алгоритмы численного статистического моделирования кинетических процессов и современная методология параллельных и распределённых вычислений

# Глава 1

## Краткое описание материала главы

- В главе 1 делается обзор актуальных задач и методов численного статистического моделирования кинетических процессов, параллельных и распределённых вычислений.
- Обзор сделан, в общей сложности, по 151 работе (публикации, программы, интернет-ресурсы).

## Глава 2

Численное статистическое моделирование при решении  
диффузионных задач с использованием распределённых  
вычислений

### Краткое описание материала главы

- В главе 2 представлены результаты, касающиеся прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов, а именно, вероятности недостижения границы области за заданное время и полной концентрации траекторий в точке.
- Материал главы нашел отражение в работах [6–9, 40, 41, 43, 58, 74].
- Параллельные программы BOUNDARY-МС и CONCENTRATION-МС описаны в разделах 2 и 3 Приложения 1.
- Для программ BOUNDARY-МС и CONCENTRATION-МС получены свидетельства о государственной регистрации [28, 29] (см. описание в Приложении 2).

### Задачи оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов

- Задачи оценивания вероятностей маловероятных или редких событий и функционалов, зависящих от маловероятных событий, чрезвычайно актуальны в таких областях, как экология, эпидемиология, теория надёжности, оценка рисков природных и техногенных катастроф, телекоммуникационные системы, страховой бизнес, финансы и др.
- Известно, что факты наступления некоторых событий, вероятность возникновения которых имеет порядок величины в пределах  $10^{-9} \div 10^{-6}$ , могут иметь катастрофические последствия/
- Трудности при оценке методом численного статистического моделирования такого рода функционалов понятны: наступление нужного события происходит для единичных испытаний из общего числа. Говорят, что такие функционалы являются плохо статистически определёнными.
- При решении практических задач реализация численных алгоритмов принципиально связана с применением многопроцессорных систем.

## Глава 2

Примеры функционалов, зависящих от маловероятных событий:

- вероятность достижения или недостижения траекториями диффузионного процесса заданной границы в течение определённого промежутка времени,
- концентрация вещества, диффундирующего в жидкой или газообразной среде, в удалённой от источника точке (малой области) за заданное время

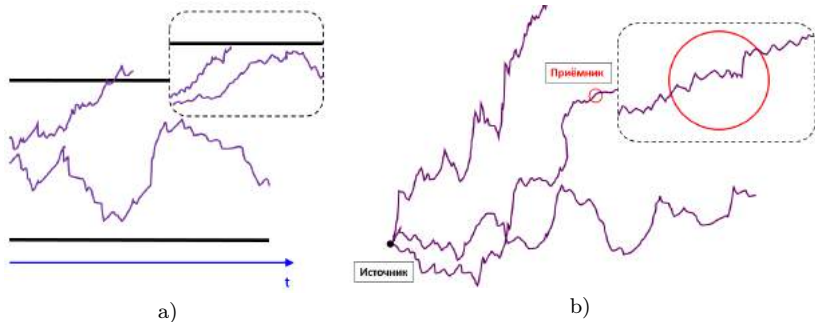


Рис.: Схемы: а) оценка вероятности недостижения границы за заданное время; б) оценка полной концентрации траекторий в малой области за заданное время.

## Глава 2

### Научная новизна полученных результатов

Результаты других авторов (упомянуты в обзоре в Главе 1):

- разработка алгоритмов на основе метода расщепления,
- разработка весовых алгоритмов.

Новизна наших результатов:

- для задачи оценки вероятности недостижения границы области траекториями за заданное время построено новое приближение к функции ценности, с помощью которого построена эффективная весовая оценка; впервые проведён сравнительный параметрический анализ оценки прямого моделирования, оценки метода расщепления и весовой оценки;
- для задачи оценки полной концентрации траекторий в точке построено новое приближение к функции ценности, с помощью которого построена эффективная весовая оценка; построен новый метод на основе комбинирования прямого моделирования, метода расщепления и весового моделирования;
- применена методика распределённых вычислений и параллельной генерации псевдослучайных чисел, пригодная для проведения параметрического анализа.



## Глава 2

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

Для статистического моделирования траекторий используется метод Эйлера:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t a(y_i) + \sqrt{\Delta t} b(y_i) \xi_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Здесь  $y_i$  – численное решение СДУ в узле  $t_i$  равномерной сетки на временном интервале с постоянным шагом интегрирования  $\Delta t = T/n$ , а  $\{\xi_i\}$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$  – последовательность независимых между собой нормальных случайных векторов с независимыми в совокупности компонентами, имеющими стандартное нормальное распределение.

Переходную плотность цепи Маркова, соответствующей методу Эйлера, обозначим через

$$r_E(y_i \rightarrow y_{i+1})$$

## Глава 2

Рассматривается задача вычисления следующих функционалов от траекторий решения СДУ:

$$\Phi = \Phi(y(\cdot), T) = \mathbf{E} \left[ \int_0^{\min(T, \tau)} h(y(t)) dt + \psi(y(\tau)) \right],$$

где  $\tau$  – момент поглощения траектории  $y(\cdot)$ , функции  $h(\cdot)$  и  $\psi(\cdot)$  – кусочно-непрерывны в  $R^m$ .

Возникают две постановки задачи параметрического анализа трудоёмкости статистических оценок, которые будут условно называться **дискретной** и **непрерывной**:

- в рамках **дискретной постановки** для вычисления траекторий задаётся модель (??) с фиксированным шагом  $\Delta t$ ; в этом случае трудоёмкость исследуется при  $T \rightarrow +\infty$ .
- в рамках **непрерывной постановки** необходимо оценить функционал, при фиксированном  $T$ ; в этом случае трудоёмкость исследуется при  $\Delta t \rightarrow 0$ .

## Глава 2

### Задача вычисления малой вероятности недостижения траекториями границы области за заданное время

Обозначим через  $p(T, t, y)$  вероятность недостижения случайным процессом  $y(\cdot)$  границы  $\Gamma$  области  $\Omega$  за время от  $t$  до  $T$  при условии, что случайный процесс начинается в точке  $y_0 \in \Omega$  в момент времени  $t \leq T$ .

Рассматривается задача прецизионного вычисления малых вероятностей  $p$ , соответствующих большим значениям  $T$ .

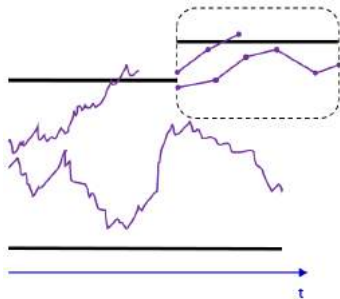


Рис.: Схема, поясняющая прямую оценку вероятности недостижения границы области.

## Глава 2

При больших  $T$  поведение функции  $p(T, 0, y_0)$  определяется экспоненциальным сомножителем первого члена в её разложении по собственным функциям эллиптического оператора:

$$p(T, 0, y_0) \approx \exp(-\rho T), \quad \rho \geq 0.$$

Соответствующая вероятность  $\varphi = \varphi(T, 0, y_0)$  записывается в виде многократного интеграла

$$\begin{aligned} \varphi(T, 0, y_0) &= P(y_0 \in \Omega, y_1 \in \Omega, \dots, y_n \in \Omega) \\ &= \int \dots \int \prod_{i=0}^{n-1} [r_E(y_i \rightarrow y_{i+1}) \chi_{\Omega}(y_{i+1})] dy_1 \dots y_n. \end{aligned}$$

Следовательно, аналоговую статистическую оценку  $\zeta_D$  можно также записать в следующем виде:

$$\zeta_D = \prod_{i=0}^n \chi_{\Omega}(y_i).$$

При больших  $T$  аналоговая оценка имеет порядок величины

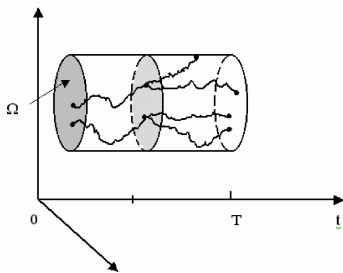
$$C(\zeta_D) \sim \exp(\rho T) / \Delta t.$$

## Глава 2

Рассмотрим вектор  $n = (n_1, n_2, \dots, n_k)$  с натуральными компонентами и случайную величину  $\zeta_S(k, n)$  – **расщеплённую оценку**:

$$\zeta_S(k, n) = \frac{1}{n_1} \sum_{j_1=1}^{n_1} \frac{1}{n_2} \sum_{j_2=1}^{n_2} \dots \frac{1}{n_k} \sum_{j_k=1}^{n_k} \zeta_D(\eta_1, \eta_2^{(j_1)}, \dots, \eta_{k+1}^{(j_k)}),$$

причём для  $i = 2, \dots, k + 1$  траектории  $\eta_i^{(1)}, \dots, \eta_i^{(n_{i-1})}$  независимы в совокупности и одинаково условно распределены при фиксированных  $\eta_1, \dots, \eta_{i-1}$ . Эти траектории начинаются в момент времени  $T_{i-1}$  в одной и той-же точке  $y_{i-1}^*$ , которая является конечным значением траектории  $\eta_{i-1}$ , причём  $y_0^* = y_0$ .



**Рис.:** Схема, поясняющая расщепленную оценку вероятности недостижения границы области.

## Глава 2

Предложена методика оптимального выбора параметров расщеплённого метода.

Выводы для расщеплённой оценки:

- для дискретной постановки задачи при  $T \rightarrow +\infty$  трудоёмкость метода расщепления будет порядка  $T^2$  и выигрыш в трудоёмкости будет величиной порядка

$$T^{-2} \exp(\rho T).$$

Таким образом, в этом случае расщеплённая оценка даёт существенный выигрыш при больших  $T$ .

- для непрерывной постановки задачи трудоёмкость расщеплённой оценки будет порядка  $1/\Delta t$  и выигрыш в трудоёмкости будет независимым от  $\Delta t$  порядка  $T^{-2} C^T$ .

## Глава 2

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

$$q_{t_i}(y_i, y_{i+1}) = \frac{k(y_i, y_{i+1})}{g_{t_i}(y_i \rightarrow y_{i+1})}$$

есть случайный весовой множитель,

$$k(y_i, y_{i+1}) = r_E(y_i \rightarrow y_{i+1})\chi_\Omega(y_{i+1}).$$

**Весовую оценку**  $\zeta_W$  можно представить в рекуррентном виде:

$$\zeta_W(t, y) = h(t, y) + q_t(y, y_1)\zeta_W(t_1, y_1)$$

где  $\zeta_W(t, y)$  - весовая оценка для траекторий, начинающихся в точке  $y$  в момент времени  $t$ .

## Глава 2

**Теорема.** Если для весовой оценки переходная плотность имеет вид

$$g_t(y \rightarrow y_1) = \frac{k(y, y_1)\varphi(T, t_1, y_1)(1 + \varepsilon(t_1, y_1))}{C(t, y)},$$

где  $|\varepsilon(t, y)| \leq C_1(\Delta t)^r$  равномерно по  $t, y$ ,  $0 < r \leq 1$ , то для её дисперсии выполняется неравенство  $\mathbf{D}\zeta_W \leq C_2 T(\Delta t)^{2r-1}$  равномерно по  $y_0$ .

Из доказанной теоремы следует, что для весовой оценки, для которой переходная плотность близка к «идеальной»

$$g_{t_i}(y_i \rightarrow y_{i+1}) = \frac{k(y_i, y_{i+1})\varphi(T, t_{i+1}, y_{i+1})}{C(t_i, y_i)},$$

порядок трудоёмкости при  $\Delta t \rightarrow 0$  определяется выражением:

$$C(\zeta_W) = t(\zeta_W) \frac{\mathbf{D}\zeta_W(z)}{(\mathbf{E}\zeta_W(z))^2} \sim \frac{1}{\Delta t} \cdot (\Delta t)^{2r-1} \sim (\Delta t)^{2r-2}.$$

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 оценки.



## Глава 2

Вероятность  $p(T, 0, y)$  является решением следующей краевой задачи для уравнения Колмогорова:

$$\frac{\partial p}{\partial T} = \sum_{i=1}^m a_i(y) \frac{\partial p}{\partial y_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m \sigma_{ij}(y) \frac{\partial^2 p}{\partial y_i \partial y_j},$$

$$p(0, 0, y) = 1, y \in \Omega \setminus \Gamma; \quad p(T, 0, y) = 0, y \in \Gamma, T > 0,$$

где  $\sigma = bb^T$ . Решение уравнения можно представить в виде ряда:

$$p(T, 0, y) = \sum_{k=1}^{\infty} T_k(T) X_k(y),$$

где  $X_k$  - собственные функции соответствующего эллиптического оператора.

Мы можем использовать собственную функцию  $X_1(y)$  в качестве аппроксимации  $p$ . Рассмотрим следующую переходную плотность:

$$g(y \rightarrow y_1) = \frac{k(y, y_1) (X_1(y_1) + \delta(y_1))}{C(t, y)},$$

где  $\delta(y)$  - непрерывная функция,  $|\delta| \leq \text{const} \Delta t$  в  $\Omega$  и  $|\delta| = \text{const} \Delta t$  на границе области  $\Omega$ .

## Глава 2

Выводы для весовой оценки:

- для дискретной постановки задачи

$$C(\zeta_W) \sim \exp(CT\Delta t).$$

Следовательно, при  $\Delta t \sim \ln T/T$  весовая оценка будет менее трудоёмка, чем аналоговая оценка.

- для непрерывной постановки задачи

$$C(\zeta_W) \sim T^2 \varphi^{-2}.$$

Отсюда следует, что при  $\Delta t \rightarrow 0$  весовая оценка дает существенный выигрыш в трудоёмкости:  $C(\zeta_D) \sim 1/\Delta t$ , а  $C(\zeta_W) \sim \text{const}$ .

## Глава 2

В расчётах использовалась программа BOUNDARY-МС и библиотека PARMONC:

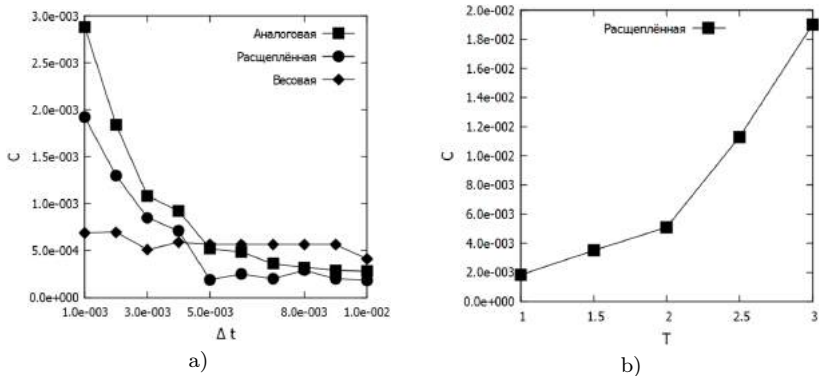


Рис.: а) непрерывная постановка задачи тестового СДУ – график с квадратиками – трудоёмкость аналоговой оценки, с кружками – трудоёмкость расщеплённой оценки, с ромбиками – трудоёмкость весовой оценки; б) дискретная постановка задачи для тестового СДУ – трудоёмкость расщеплённой оценки.

## Глава 2

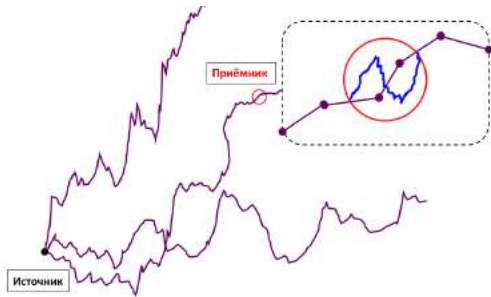
### Задача вычисления полной концентрации траекторий в точке

Рассмотрим задачу вычисления полной концентрации  $\Phi(T, y_c)$  соответствующих диффузионных траекторий во временном интервале от 0 до  $T$  в некоторой заданной удалённой от источника точке  $y_c$ .

По определению,

$$\Phi(T, y_c) = \int_0^T u(t, y_c) dt,$$

где  $u(t, y)$  - концентрация траекторий в момент времени  $t$  в точке  $y$ .



## Глава 2

Рассмотрим шар  $\Omega_c$  радиуса  $r_c$  с центром в точке  $y_c$ . Заменяем в интеграле  $u(t, y_c)$  средним значением по шару  $\Omega_c$ :

$$\int_0^T u(t, y_c) dt \approx \frac{1}{V_c} \int_0^T dt \int_{\Omega_c} u(t, y) dy,$$

где  $V_c$  – объём шара  $\Omega_c$ . Можно показать, что

$$\Phi(T, y_c) \approx \mathbf{E} \int_0^T w(y(t)) dt, \quad w(y) = \frac{\chi_{\Omega_c}(y)}{V_c}.$$

Функционал  $\Phi(T, y_c)$  от точных диффузионных траекторий приблизим функционалом  $\varphi(T, y_c)$  от приближённых траекторий – математическим ожиданием от аналоговой оценки  $\zeta_D(0, y_0)$ :

$$\varphi(T, y_c) = \mathbf{E} \zeta_D(0, y_0) = \mathbf{E} \sum_{i=0}^n w(y_i) \Delta t.$$

Следовательно, трудоёмкость прямого моделирования оценивается величиной порядка  $\Delta t^{-1}$ :

$$C(\zeta_D(z)) = t(\zeta_D) \frac{\mathbf{D}\zeta_D(z)}{(\mathbf{E}\zeta_D(z))^2} \sim \frac{C}{\Delta t}.$$

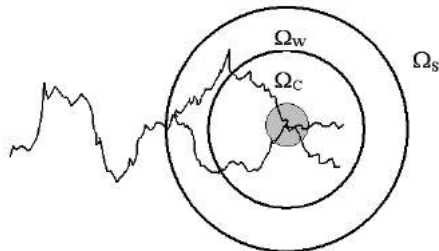
## Глава 2

Комбинированная оценка (прямое моделирование + расщепление + весовое моделирование):

- Пусть при прямом моделировании в момент времени  $t$  узловая точка приближённой траектории  $y$  попадает в шар  $\Omega_S$ .
- Начиная с точки  $z = (t, y)$  строятся  $s$  условно-независимых оценок  $\zeta^{(i)}(z)$ ,  $i = 1, \dots, s$ . Для каждой из них сначала производится прямое моделирование.
- При попадании в шар  $\Omega_w$  происходит переход на весовое моделирование, а при выходе из  $\Omega_w$  опять происходит переход на прямое моделирование.

Результативная оценка имеет вид:

$$\zeta_{SW}(z) = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \zeta^{(i)}(z).$$



## Глава 2

Применение метода расщепления позволяет уменьшить дисперсию:

$$\mathbf{D}\zeta_{SW}(z_0) \leq \mathbf{D}\zeta_W(z_0) \leq \mathbf{D}\zeta_D(z_0),$$

где  $\zeta_W$  - весовая оценка,  $z_0 = (0, y_0)$ .

Вывод:

- разработанный комбинированный алгоритм позволяет уменьшить трудоемкость моделирования на порядка по сравнению с прямым моделированием,
- вычисления с помощью программы **CONCENTRATION-MS** и библиотеки **PARMONC** для ряда тестовых задач показали, что выигрыш в трудоёмкости по сравнению с прямым моделированием – в  $10 \div 100$  раз!

## Глава 3

Численное статистическое моделирование пространственно  
неоднородной коагуляции с использованием распределённых  
вычислений



### Краткое описание материала главы

- В главе 3 представлены результаты по разработке и исследованию вероятностной модели пространственно неоднородной коагуляции и реализующего её экономичного параллельного алгоритма метода прямого статистического моделирования.
- Материал главы нашел отражение в работах [11, 12, 15–17, 42, 44, 46–50, 52, 60–62].
- Параллельная программа COAGULATION-MS описана в разделе 4 Приложения 1.
- Для программы COAGULATION-MS получено свидетельство о государственной регистрации [30] (см. описание в Приложении 2).

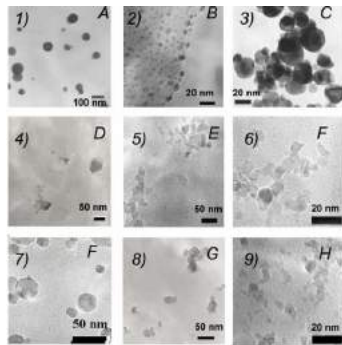
## Глава 3

### Задачи моделирования пространственно неоднородной коагуляции

- Задачи моделирования пространственно неоднородной коагуляции чрезвычайно актуальны при изучении атмосферных аэрозолей, образования части сажи и оксидов в пламенном синтезе и др. областях.
- Использование большого числа тестовых частиц с целью адекватного моделирования – необходимость при использовании метода прямого статистического моделирования.



a)



b)

Рис.: а) пирогенный синтез наночастиц, б) микрофотографии наночастиц, полученных с помощью пламенного синтеза.

## Глава 3

При распараллеливании алгоритмов следует анализировать их «внутренние» свойства. Перечислим общие требования к параллельным алгоритмам, сформулированные в работе [1]:

1. Численный метод должен обладать внутренним параллелизмом. Конечный результат, определяемый алгоритмом, может быть достигнут одновременным решением ряда подзадач, каждая из которых обрабатывается на своем собственном процессоре.
2. Параллельный алгоритм должен обеспечивать равномерную загрузку процессоров.
3. Параллельный алгоритм должен обладать логической простотой.
4. Во время расчёта обмен информацией между процессорами должен быть минимальным.
5. Параллельный алгоритм должен обеспечивать получение правильных результатов при вычислениях с высокой точностью (на более подробных пространственно-временных сетках).

[1] Четверушкин Б. Н. *Высокопроизводительные многопроцессорные вычислительные системы* // Вестник РАН. 2002. Т. 72, №9. С. 786–794.

## Глава 3

### Научная новизна полученных результатов

Результаты других авторов (упомянуты в обзоре в Главе 1):

- разработаны полуэвристические (имитационные) т.н. «ячеечных» алгоритмов статистического моделирования пространственно неоднородной коагуляции,
- применяются также конечно-разностные схемы для решения нелинейного уравнения коагуляции.

Новизна наших результатов:

- разработан новый экономичный параллельный алгоритм прямого статистического моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции с учётом внешнего поля скоростей (при этом используется корректная пространственная регуляризации ядра коагуляции, применяется метод «мажорантной частоты», проводится обоснование с использованием полуэвристической гипотезы «молекулярного хаоса»);
- проведено исследование эффективности распараллеливания в зависимости от параметров параллельного алгоритма при условии, что с ростом числа процессоров возрастает число модельных частиц;
- применена методика распределённых вычислений и параллельной генерации псевдослучайных чисел, пригодная для проведения параметрического анализа.

Вероятностная модель пространственно неоднородной коагуляции.  
Параллельный алгоритм метода прямого статистического  
моделирования

Рассмотрим задачу Коши для системы нелинейных уравнений, описывающих процесс пространственно неоднородной коагуляции частиц (для краткости – **уравнение коагуляции**):

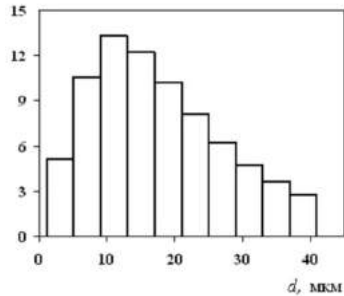
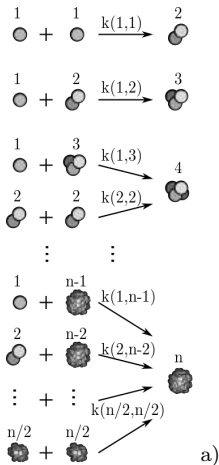
$$\frac{\partial c_1}{\partial t} + \operatorname{div}(vc_1) = -c_1 \sum_{j=1}^{\infty} K(1, j)c_j,$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \operatorname{div}(vc_i) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K(i-j, j)c_{i-j}c_j - c_i \sum_{j=1}^{\infty} K(i, j)c_j, \quad i \geq 2,$$

$$c_i(0, x) = c_i^0(x), \quad i = 1, 2, \dots$$

Уравнение рассматривается в пространственно-временной области  $\Omega \times (0, T]$ , где **вычислительная область**  $\Omega \subset R^3$ ,  $T < \infty$ . В уравнении  $c_i = c_i(t, x)$ ,  $i = 1, 2, \dots$  - концентрация  $i$ -меров в момент времени  $t$  в пространственной точке  $x$ ,  $v = v(x)$  - пространственно неоднородное поле скоростей,  $K(i, j)$  - ядро коагуляции,  $c_i^{(0)}(x)$ ,  $i = 1, 2, \dots$  - концентрация  $i$ -меров при  $t = 0$ .

## Глава 3



b)

Рис.: Схемы: а) процесс коагуляции , б) распределение частиц по размерам.

## Глава 3

Считается, что начальная концентрация нормирована на единицу в области  $\Omega$ :

$$\int_{\Omega} \sum_{i=1}^{\infty} c_i^{(0)}(x) dx = 1.$$

Рассмотрим следующие функционалы от решения уравнения коагуляции:

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

Назовем «тестовой частицей» пару значений  $p_k = (l_k, x_k)$ . Здесь  $l_k$  - размер тестовой частицы,  $x_k \in R^3$  - координата частицы. Для решения уравнения коагуляции будем моделировать реализации ансамбля тестовых частиц

$$\xi = \xi(T) = \{p_1, p_2, \dots, p_N\},$$

где  $N = N(T)$ . Обозначим через  $N_0$  начальное значение тестовых частиц.

Скорость тестовой частицы не включается в её фазовое состояние. Этим предлагаемый алгоритм отличается от алгоритма решения пространственно неоднородного уравнения Больцмана. В нашем случае поле скоростей  $v(x)$  для частиц определено заранее.

## Глава 3

Функционал  $\varphi_i(T)$  оценивается по следующей формуле:

$$\varphi_i(T) \approx E\zeta_i \approx \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \zeta_i^{(k)},$$

где выборочное значение  $\zeta_i^{(k)}$  есть функция от  $\xi$ :  $\zeta_i^{(k)} = \zeta_i(\xi^{(k)}(T))$ ,  $E$  - математическое ожидание случайной оценки  $\zeta_i$ .

Функция  $\zeta_i$  при этом определяется следующим образом:

$$\zeta_i(\xi(T)) = \frac{n_\xi(T, i, G)}{N_0},$$

где  $n_\xi(T, i, G)$  есть количество тестовых частиц  $p = (l, x)$  при  $t = T$ , для которых  $l = i$  и  $x \in G$ .

Показывается, что математическое ожидание  $E\zeta_i$  и дисперсия  $D\zeta_i$  существуют и конечны.



## Глава 3

Произведем пространственную регуляризацию ядра коагуляции с целью замены взаимодействия частиц в точке их взаимодействием в малой области (два способа):

1. Разобьем область  $\Omega$  на малые непересекающиеся подобласти  $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_S$  – **области взаимодействия**. Регуляризованное ядро коагуляции запишется следующим образом:

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

где  $\chi_{\Omega_s}(x)$  - индикаторная функция области  $\Omega_s$ ,  $\rho_s$  - объём  $\Omega_s$ .

2. Будем считать, что взаимодействие происходит при попадании пары частиц внутрь шара заданного радиуса  $r$ . В таком случае

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

где

$$h(x_1, x_2) = \begin{cases} 0, & \text{если } |x_1 - x_2| > r; \\ \frac{1}{(4/3)\pi r^3}, & \text{если } |x_1 - x_2| < r. \end{cases}$$

## Глава 3

Допустим, что для ядра коагуляции  $K(i, j)$  существует мажоранта:

$$K(i, j) \leq \widehat{K} < \infty.$$

Тогда мажоранта  $\widehat{K}^\rho(p_1, p_2)$  для регуляризованного ядра запишется следующим образом:

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

где

$$\rho = \begin{cases} \min_{s=1, \dots, S} \rho_s & \text{для «ячеечной» регуляризации ядра;} \\ (4/3)\pi r^3 & \text{для «безячеечной» регуляризации ядра.} \end{cases}$$

Разобьем интервал  $[0, T]$  на подинтервалы длиной  $\Delta t$ . На каждом подинтервале

$$((i-1)\Delta t, i\Delta t), \quad i = 1, 2, \dots, T/\Delta t$$

разделим моделирование актов коагуляции и пространственного перемещения частиц (т.е. используем т.н. метод «расщепления по физическим процессам»).

Метод «мажорантной частоты».

Случайное состояние ансамбля тестовых частиц в момент времени  $t$  определяется  $N$ -частичной функцией распределения  $P_N(t, \bar{L}, \bar{X})$ , причём

$$\int_{\Omega_N} d\bar{X} \mathbf{S}_{\bar{L}} P_N(t, \bar{L}, \bar{X}) = 1.$$

Рассмотрим следующие функционалы от функции  $P_N$ :

$$\tilde{\varphi}_i(T) = \int_{\Omega_N} d\bar{X} \mathbf{S}_{\bar{L}} H_i(\bar{L}, \bar{X}) P_N(T, \bar{L}, \bar{X}), \quad i = 1, 2, \dots,$$

Можно показать, что,

$$\tilde{\varphi}_i(T) \approx \varphi_i(T).$$

По известным правилам можно записать кинетическое уравнение для функции  $P_N$  и вывести интегральное уравнение для плотности столкновений (актов коагуляции)

$$\varphi(t, \bar{L}, \bar{X}) = \hat{\nu}' P_N(t, \bar{L}, \bar{X}).$$

## Глава 3

Моделирование выборочного значения ансамбля тестовых частиц  $\xi = \xi(T)$ :

1. Моделирование начального распределения частиц.
2. Моделирование времени  $\tau$  между двумя коагуляционными актами по экспоненциальному закону с параметром

$$\hat{\nu} = \frac{1}{2N_0} \sum_{i \neq j} \hat{K}^\rho(p_i, p_j) = \frac{N(N-1)\hat{K}}{2N_0\rho}.$$

Установим  $t_c = t_c + \tau$ . Если  $t_c > \Delta t$ , то происходит переход к п. 6.

3. Выбор пары частиц  $(p_i, p_j)$  равновероятно из множества всех пар.
4. Моделирование реального или фиктивного коагуляционного актов для выбранной пары.

При реальном акте выбранная пара  $(p_i, p_j)$  образует одну частицу и состояние ансамбля меняется:

$$\{p_1, \dots, p_i, \dots, p_j, \dots, p_N\} \rightarrow \{p_1, \dots, p'_i, \dots, p_{N-1}\}, \quad N \rightarrow N - 1, \\ p_i = (l_i, x_i), \quad p_j = (l_j, x_j) \rightarrow p'_i = (l_i + l_j, x_i), \quad i < j \quad .$$

При фиктивном акте состояние ансамбля не изменяется.

5. Переход к п. 2.
6. Моделирование пространственного перемещения всех частиц.
7. Если  $t < T$ , то алгоритм переходит к п. 2. Если  $t \geq T$ , то моделирование прекращается.

## Глава 3

Рассмотрим функцию  $\psi$ , определённую соотношением:

$$\varphi(t, \bar{L}, \bar{X}) = \int_0^\infty \chi_{[0,T)}(t') \hat{\nu}' \exp(-\hat{\nu}'(t-t')) \psi(t', \bar{L}, \bar{X}) dt'.$$

Функция  $\psi$  является решением следующего интегрального уравнения

$$\psi(t, \bar{L}, \bar{X}) = \int_0^\infty dt' \int_{\Omega_N} d\bar{X}' \mathbf{S}_{\bar{L}'} K_{123}(t', \bar{L}', \bar{X}' \rightarrow t, \bar{L}, \bar{X}) \psi(t', \bar{L}', \bar{X}') + \psi_0(t, \bar{L}, \bar{X}),$$

где

$$K_{123}(t', \bar{L}', \bar{X}' \rightarrow t, \bar{L}, \bar{X}) = \chi_{[0,T)}(t') \cdot K_1(t | t', \bar{L}', \bar{X}') \cdot K_2(\bar{L} | t, \bar{L}', \bar{X}') \cdot K_3(\bar{X} | t, \bar{L}, \bar{X}'),$$

$$K_1(t | t', \bar{L}', \bar{X}') = \hat{\nu}' \exp(-\hat{\nu}'(t-t')), \text{ при условии } t > t',$$

$$K_2(\bar{L} | t, \bar{L}', \bar{X}') = \sum_{i < j} \frac{2}{N(N-1)} [ P_r(p'_i, p'_j) \theta(l'_i + l'_j, l_i) \theta(0, l_j)$$

$$+ P_f(p'_i, p'_j) \theta(l'_i, l_i) \theta(l'_j, l_j) ] \prod_{k=1, k \neq i, j}^N \theta(l'_k, l_k),$$

$$K_3(\bar{X} | t, \bar{L}, \bar{X}') = \prod_{k=1}^N \delta(x_k - x'_k - v(x'_k)(t-t')),$$

$$\psi_0(t, \bar{L}, \bar{X}) = \delta(t) P_N(0, \bar{L}, \bar{X}).$$

## Глава 3

Функции  $P_f$  и  $P_r$  определяются следующим образом:

- вероятность реального коагуляционного акта равна

$$P_r(p_i, p_j) = \frac{K^\rho(p_i, p_j)\rho}{\widehat{K}},$$

- вероятность фиктивного коагуляционного акта равна

$$P_f(p_i, p_j) = 1 - P_r(p_i, p_j).$$

Рассмотрим следующий аналог оценки «по поглощениям»:

$$\eta_i = H_i(\bar{L}_{K_b-1}, \bar{X}_{K_b-1}).$$

По сути, это выражение является другой формой записи функционала. Пользуясь известными методами, можно доказать, что

$$E\eta_i = \tilde{\varphi}_i(T).$$

## Глава 3

В практических задачах  $N_0$  настолько велика, что выборочные значения  $\xi$  не помещаются в памяти одного процессора.

Рассмотрим  $M$ -процессорную вычислительную систему. Область  $\Omega$  «разрезается» на  $M$  непересекающихся **процессорных областей**

$$\widehat{\Omega}_1, \widehat{\Omega}_2, \dots, \widehat{\Omega}_M.$$

Тестовые частицы сортируются по процессорным областям и в каждой  $\widehat{\Omega}_m$  моделируется эволюция подансамбля  $\xi^{(m)}$ :

$$\xi = \{\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \dots, \xi^{(M)}\}, \quad \xi^{(m)} = \{p_1^{(m)}, p_2^{(m)}, \dots, p_{n_m}^{(m)}\},$$

где  $n_m$  – количество частиц в  $m$ -й процессорной области.

Запишем мажорантную частоту в следующем виде:

$$\widehat{\nu} = \sum_{m=1}^M \widehat{\nu}_m,$$

где

$$\widehat{\nu}_m = \frac{1}{2N_0} \sum_{i \neq j} \widehat{K}^p(p_i, p_j),$$

причём суммирование осуществляется по частицам из области  $\widehat{\Omega}_m$ .

## Глава 3

Параллельное моделирование эволюции ансамбля частиц:

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 распределено с параметром

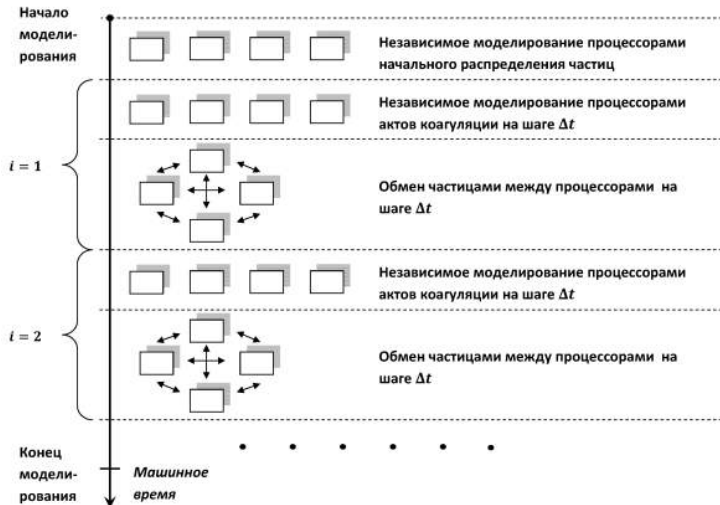
$$\hat{\nu}_m = \frac{n_m(n_m - 1)\hat{K}}{2N_0\rho}.$$

3. В конце шага  $\Delta t$  все процессоры обмениваются частицами (см. п. 6 однопроцессорного алгоритма).
4. Параллельный алгоритм переходит к п. 2.



## Глава 3

Схема параллельного алгоритма метода ПСМ приведена на рис.:



### Исследование эффективности параллельного алгоритма метода прямого статистического моделирования

Вычислительные проблемы при реализации параллельного алгоритма метода прямого статистического моделирования:

- количество тестовых частиц должно быть достаточно большим для построения удовлетворительных статистических оценок;
- при отображении алгоритма метода ПСМ на параллельную вычислительную систему будем придерживаться такой стратегии: с увеличением количества процессоров мы так меняем параметры алгоритма, что погрешность вычислений уменьшается,
- с одной стороны, уменьшение погрешности расчётов при увеличении количества процессоров приводит к росту вычислительной трудоёмкости параллельного алгоритма.
- Необходим анализ зависимости трудоёмкости от величины погрешности. В частности, нужно исследовать величины дисперсий оценок статистического моделирования.

**Задача:** дать рекомендации по выбору параметров параллельного алгоритма с целью уменьшения трудоёмкости.

## Глава 3

Перечислим параметры параллельного алгоритма метода ПСМ:

$$\xi = \xi(\bar{p}, N_0, \Delta t, \rho, M, \{\hat{\Omega}_m\}_{m=1}^M),$$

где  $\bar{p}$  – множество параметров уравнения коагуляции и функционала.

Назовем «относительной эффективностью» параллельного разложения следующую функцию:

$$\Phi = \frac{C(\zeta_i)|_{M=1}}{C(\zeta_i)|_{M>1}} = \frac{t_1|_{M=1}}{t_1|_{M>1}}.$$

Здесь при моделировании значения параметров  $\bar{p}, N_0, \Delta t, \rho$  одинаковы для случаев  $M = 1$  и  $M > 1$ . Разумеется, относительная эффективность может быть практически измерена лишь для относительно небольших  $N_0$ .

**Введем зависимость величины  $N_0$  от количества процессоров  $M$ :**

$$N_0 \sim M^d, \quad 0 \leq d \leq 1.$$

Допускается рост начального количества частиц, отличный от прямо пропорциональной зависимости от количества процессоров.

## Глава 3

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 оценки  $t_i^{(e)}$  ограничимся верхней границей:

$$t_i^{(e)} \leq C_e N_0 M^r \Delta t, \quad i = 1, 2, \dots, T/\Delta t,$$

где  $r \geq 0$ ,  $C_e = \text{const}$ .

Рассматривая верхнюю границу для  $t_i^{(e)}$  как наихудший (в плане времени выполнения) вариант обмена данными, получим

$$Et^{(e)} \sim C_e N_0 M^r.$$

## Глава 3

Таким образом, величина относительной эффективности удовлетворяет следующим асимптотическим соотношениям 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  $\Phi \sim M^{d-r} \rightarrow \infty$ .

Для проверки теоретических выводов рассмотрим следующую тестовую задачу для уравнения коагуляции:

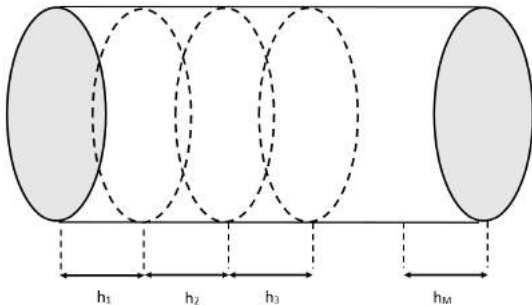
- область  $\Omega$  является цилиндром, чья ось параллельна оси ОХ, длина  $L = 10$ , радиус  $R = 1$ , объём  $V = \pi R^2 L$ ;
- ядро коагуляции  $K(i, j, \bar{x}) \equiv 1$  для всех  $\bar{x} \in \Omega$ ;
- поле скоростей направлено вдоль оси ОХ:  $\bar{v}(\bar{x}) = (v_x(\bar{x}), 0, 0)$ ;
- начальная 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 можно записать точное решение.

## Глава 3

В проведённых расчётах использовался следующий способ «разрезания» вычислительной области на процессорные области (см. рис. 7):

- цилиндр разрезался на подобласти перпендикулярно оси  $OX$ ,
- подобласти имеют одинаковый объём.



**Рис.:** Схема, поясняющая способ «разрезания» вычислительной области на процессорные области.

## Глава 3

В проведённых численных экспериментах применялась программа COAGULATION-MS и библиотека PARMONC.

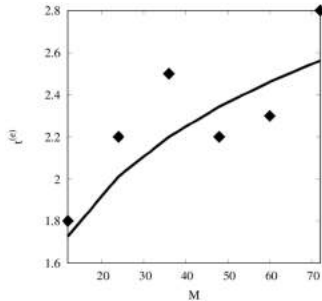
При назначении псевдослучайных чисел по процессорам использовался вариант распределённого способа для массивно-параллельных вычислительных системы для случая, когда моделирование каждой реализации осуществляется совместно на нескольких процессорах. Параллельные программы запускались на кластере НКС-30Т ЦКП ССКЦ СО РАН.

Уровень относительной статистической погрешности оценки всех функционалов – менее 10 %.

Использованное при вычислениях оборудование и программное обеспечение:

- серверы HP ProLiant SL390s G7, каждый – с двумя 6-ядерными процессорами Intel Xeon X5670 (2.93 ГГц), оперативная память – 96 Гб на вычислительный узел, всего использовалось до 72 вычислительных ядер,
- Intel Composer XE 2013 for Linux (Fortran Intel 64 Compiler),
- Intel MPI Version 4.1,
- инструменты для измерения производительности параллельных программ Intel Trace Analyzer and Collector Version 8.1.

## Глава 3



**Рис.:** Зависимость величины  $t^{(e)}$  от количества процессоров  $M$ . Сплошная линия - наилучшее приближение, точки - результаты измерений.



## Глава 3

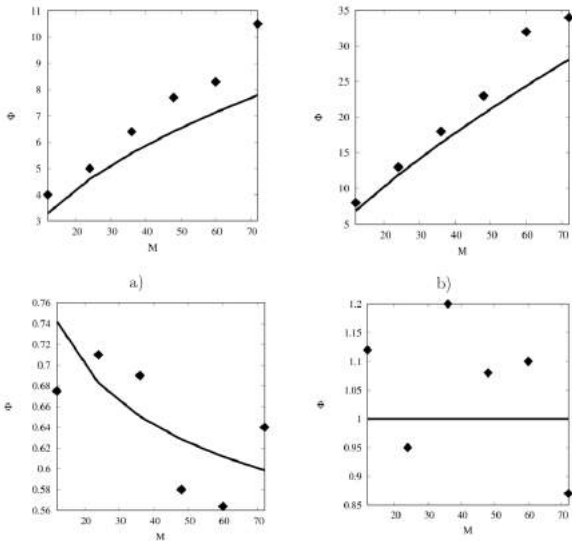


Рис.: Зависимость величины  $\Phi$  от количества процессоров  $M$  для случаев а)  $d = 0.7$ , б)  $d = 1.0$ , в)  $d = 0.1$ , д)  $d = 0.22$ .

## Глава 4

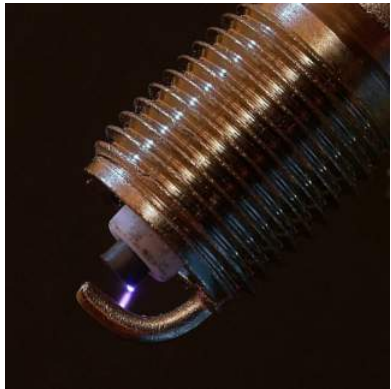
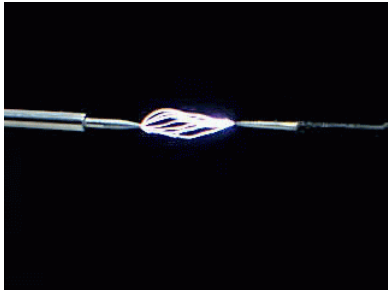
Численное статистическое моделирование процесса переноса  
заряженных частиц с использованием с использованием  
распределённых вычислений

### Краткое описание материала главы

- В главе 4 приводятся результаты, касающиеся разработки и исследования вероятностной модели развития электронных лавин в газе и реализующего её параллельного алгоритма численного статистического моделирования.
- Материал главы нашел отражение в работах [21, 24–26, 36].
- Параллельная программа **ELSHOW** описана в разделе 5 Приложения 1.
- Для программы **ELSHOW** получено свидетельство о государственной регистрации [31] (см. описание в Приложении 2).

## Глава 4

Задачи моделирования переноса заряженных частиц в газе, а именно, процесса ионизационного размножения электронов чрезвычайно актуальны в физике и технике при изучении при изучении искровых разрядов, космических «ливней» и др. явлений.



## Глава 4

Постановка появилась при выполнении проекта по моделированию разрядов в плазматроне:

- ИП СО РАН №126 «Импульсные разряды в газах высокого давления и моделирование газоразрядных, плазмохимических и газодинамических процессов методом Монте-Карло»

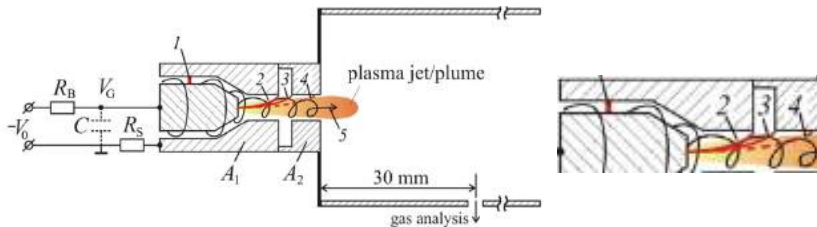


Рис.: Схема плазматрона и участков разряда.

## Глава 4

Численные подходы для моделирования:

- детерминистские методы, например, метод расчета функции распределения или численное решение уравнений переноса,
- метод статистического моделирования – моделирование эволюции ансамблей частиц.

Плюсы и минусы алгоритмов метода статистического моделирования:

- **Плюс:** возможность изучения динамики процесса развития лавины во времени и влияния на нее незначительных флуктуаций,
- **Минус:** лавинообразное нарастание количества электронов и ионов (моделируемых частиц, для каждой из которых необходимо решать уравнения движения).

Способы преодоления вычислительных сложностей:

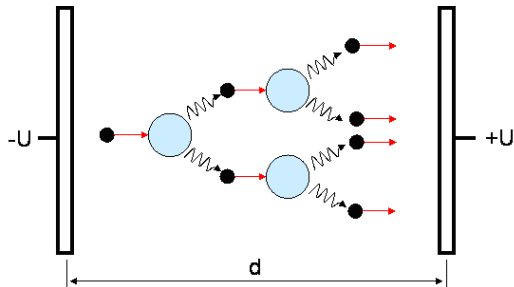
- использование различных методов укрупнения (когда моделируемая частица представляется в виде облака, имеющего в себе несколько элементарных частиц) – это приводит к снижению точности,
- использование распараллеливания и решение задачи на многопроцессорной супер-ЭВМ – это позволяет учитывать траектории каждого отдельно взятого электрона.

## Глава 4

Мы выбрали использование «подробного» моделирования и применения методов распараллеливания.

Новизна наших результатов:

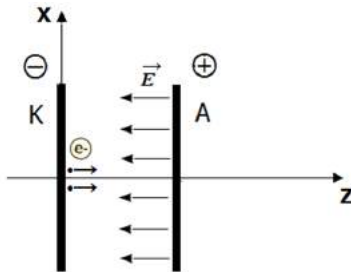
- построена вероятностная модель развития лавин на основе ветвящихся случайных процессов и проведен обоснованный выбор её параметров,
- применена методика распределённых вычислений и параллельной генерации псевдослучайных чисел, пригодная для проведения параметрического анализа,



## Глава 4

Физическая постановка:

- Рассматривается система с внешним электрическим полем с постоянной напряжённостью  $\mathbf{E} = (0, 0, -E_z)$ .
- Пространство заполнено азотом  $N_2$  с концентрацией  $N$  и давлением  $p$ .
- Задаются (в табулированном виде) сечения упругого рассеяния, возбуждения и ионизации – всего 24 типа взаимодействий для азота.



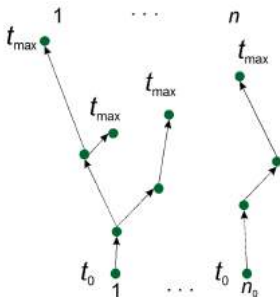


## Глава 4

### Алгоритм численного статистического моделирования, основанный на моделировании траекторий ветвящихся процессов

:

- В ходе моделирования с катода из точки  $\mathbf{r} = (x, y, z) = (0, 0, 0)$  в момент времени  $t = 0$  происходит эмиссия  $n_0$  электронов с нулевыми энергиями.
- Траектории движения каждого из электронов прослеживаются до достижения времени  $t_{max}$ . С этой целью делаются одинаковые шаги  $\Delta t$  по времени. При этом используется лексикографическая схема.



## Глава 4

- За один шаг по времени электрон с энергией  $T_{i-1}$  перемещается из точки  $\mathbf{r}_{i-1}$  в точку  $\mathbf{r}_i$ , где  $i$  - номер шага, а его координата и скорость  $\mathbf{V}_i = (V_x, V_y, V_z)$  изменяются следующим образом:

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} + \mathbf{V}_{i-1}\Delta t - e\mathbf{E}(\Delta t)^2/(2m_0), \quad \mathbf{V}_i = \mathbf{V}_{i-1} - e\mathbf{E}\Delta t/m_0,$$

где  $e$  - заряд электрона,  $m_0$  - его масса.

- В конце каждого временного шага разыгрывается столкновение с вероятностью

$$P = 1 - \exp\left(-\sigma_{tot}(T_i)N\Delta\ell\right),$$

где  $\sigma_{tot}$  - полное микроскопическое сечение взаимодействий,  
 $\Delta\ell = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}|$ .

- Затем разыгрывается тип взаимодействия в соответствии с сечениями упругого рассеяния, возбуждения и ионизации.
- Упругое рассеяние не меняет энергию частицы, а направление движения моделируется согласно дифференциальным сечениям. При этом «азимутальный» угол выбирается равновероятно на отрезке  $[0, 2\pi]$ , а «зенитный» определяется как угол между предыдущим и последующим направлениями вектора скорости.

## Глава 4

- Для всех видов возбуждения энергия уменьшается на величину потенциала возбуждения, а направление движения разыгрывается также, как и 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:

$$T^{(1)} = T_1 + T_2, \quad T_1 = T - \omega T_{bd}, \quad T_2 = (\omega - 1)T_{bd},$$

где  $\omega$  - доля переданной энергии. Из простых кинематических уравнений (законов сохранения импульса и энергии) можно получить направления движения образующихся в результате ионизации электронов. Они задаются зенитными углами вылета  $\theta_1$  и  $\theta_2$ :

$$\sin^2 \theta_1 = T_2/T^{(1)}, \quad \sin^2 \theta_2 = T_1/T^{(1)}.$$

Соответствующие азимутальные углы связаны между собой соотношением  $\varphi_1 = \varphi_2 + \pi$ , причём один из них выбирается равновероятно на отрезке  $[0, 2\pi]$ .

## Глава 4

В ходе моделирования в определённые моменты времени  $t_i$ ,  $i = 1, \dots, K$  строятся оценки следующих функционалов:

- количество частиц  $n(t_i)$ ,
- положение центра масс:

$$\langle x \rangle = \sum_{k=1}^n x_k(t_i)/n(t_i), \quad \langle y \rangle = \sum_{k=1}^n y_k(t_i)/n(t_i), \quad \langle z \rangle = \sum_{k=1}^n z_k(t_i)/n(t_i),$$

- скорость центра масс  $V_c(t_i) = \langle z \rangle / t_i$ ,
- средняя скорость  $\langle V_z \rangle = \sum_{k=1}^n V_{z,k}(t_i)/n(t_i)$ ,
- средняя кинетическая энергия  $\langle T \rangle = \sum_{k=1}^n T_k(t_i)/n(t_i)$ ,
- полигон частот,
- коэффициенты продольной  $D_L$  и поперечной диффузии  $D_T$ ,
- частота ионизации  $\nu_{ion}$ ,
- коэффициент ударной ионизации  $\alpha_{ion}$ .

## Глава 4

Сравнение с известными экспериментальными и расчётными данными.

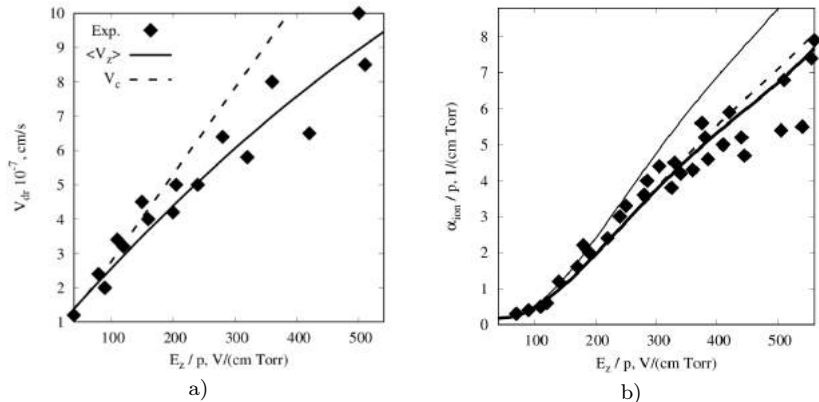


Рис.: а) Зависимость скорости дрейфа от  $E_z/p$ ; сплошная кривая –  $\langle V_z \rangle$ ; пунктир –  $V_c$ ; ромбики – экспериментальные данные; б) Зависимость приведённого коэффициента ударной ионизации от  $E_z/p$ ; пунктирная линия – расчёт по специальной эвристической формуле; сплошная широкая линия – специальный расчёт с ограничением  $z = d$ ; тонкая линия – BOLSIG+; ромбики – экспериментальные данные.

## Глава 4

Покажем, как увеличения величины напряжения приводит к образованию «хвостов» высокоэнергетичных электронов (выделено красным прямоугольником).

Такие «хвосты» можно получить только с помощью метода Монте-Карло.

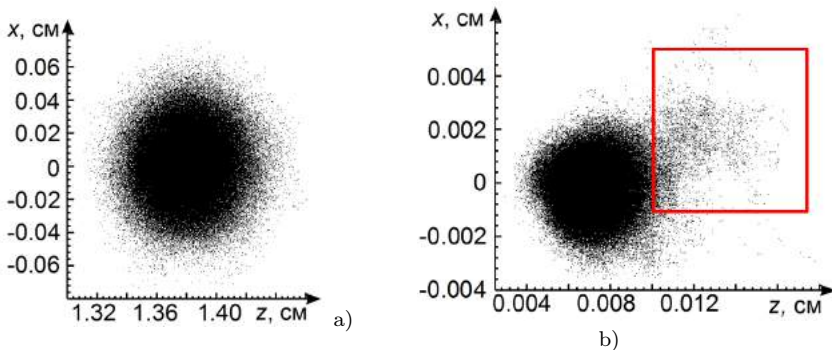


Рис.: Сечение реализации электронной лавины в плоскости XZ: а)  $E/p = 50 \text{ V} / (\text{cm Torr})$ , б)  $E/p = 500 \text{ V} / (\text{cm Torr})$

### Модификация алгоритма распределённого численного статистического моделирования

#### Вычислительные проблемы при моделировании деревьев частиц:

- число обрабатываемых частиц в дереве (и машинное время не его обработку) растёт по экспоненциальному закону с ростом  $t_{max}$ ;
- при реализации лексикографической схемы объём оперативной памяти, требуемой для хранения массива частиц, пропорционален числу переходов в дереве;
- при моделировании «длинных» деревьев величина дисперсии оценок функционалов большая.

**Задача:** разработать эффективную модификацию параллельного алгоритма с целью уменьшения его трудоёмкости.

## Глава 4

Методику распределённого статистического моделирования, в которой моделирование независимых реализаций дерева частиц распределяется по разным вычислительным ядрам, будем называть **крупноблочным распараллеливанием**.

Особенности реализации крупноблочного распараллеливания на массивно-параллельной вычислительной системе:

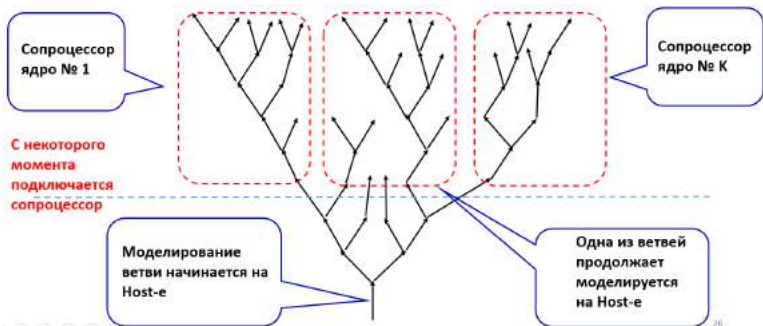
- в случае большого числа частиц в дереве вычислительные ядра сохраняют «избыточные» частицы на диск для дальнейшей обработки;
- на каждом вычислительном узле можно запускать MPI-процессов меньше, чем число ядер – в таком случае ядра одного узла могут обмениваться «избыточными» частицами через общую память, а при необходимости сохранять их на диск для дальнейшей обработки.



## Глава 4

Рассмотрим методику **мелкоблочного распараллеливания**:

- при наличии достаточного количества ядер можно использовать более детальное распараллеливание, выделяя вложенные вычислительные блоки в алгоритме моделирования всего дерева;
- а именно, при накоплении достаточно большого количества частиц в «магазине», моделирование ветвей дерева, происходящих от этих частиц, можно распределить по свободным ядрам; для каждой такой ветви учитывается её вклад в оценку функционала:



## Глава 4

Допустим, вычислительный узел состоит из основного процессора и многоядерного сопроцессора.

Особенности реализации мелкоблочного распараллеливания:

- в случае большого числа частиц в дереве ядра обмениваются «избыточными» частицами через общую память,
- при необходимости, ядра передают их на CPU ядро (связанное с сопроцессором), который сохраняет их на диск для дальнейшей обработки;
- на сопроцессоре можно быстро организовать перераспределение вычислительной нагрузки между ядрами.

Такой подход позволяет существенно повысить эффективность по сравнению с крупноблочным распараллеливанием – таким образом можно смоделировать большее число реализаций за заданное время.

## Глава 4

Поскольку узлы гибридной системы имеют в своем составе разные вычислители (CPU-ядра и сопроцессоры), то целесообразно комбинировать многоуровневое распараллеливание следующим образом:

- на каждом вычислительном узле часть CPU-ядер будет моделировать реализации согласно методике крупноблочного распараллеливания;
- сопроцессоры узла (и «прикрепленные» к ним CPU-ядра) будут моделировать реализации лавины по методике глубокого распараллеливания;

При моделировании ветвей также следует использовать распределительный способ для получения псевдослучайных чисел (см. вариант №4 распределения псевдослучайных чисел).

При этом можно эффективно осуществлять обмен «избыточными» частицами между оперативной памятью и жёстким диском.

## Глава 4

Расчёты с использованием программы ELSHOW и библиотеки PARMONC:

- Для одной из постановок задачи сравнивался эффект от применения методики крупноблочного распараллеливания с эффектом от применения методики комбинированного распараллеливания (на одном вычислительном узле).
- При вычислениях варьировалась только величина  $t_{max}$ , что давало в конце моделирования различное количество частиц в лавине (большем значению времени соответствовало большее количество частиц).
- Для каждого сочетания методики распараллеливания и величины  $t_{max}$  оценивались значения функции  $L = L(t)$ , где  $L(t)$  – среднее количество реализаций лавины частиц, полученных к моменту машинного времени  $t$ .
- Как показали расчёты, для  $t_{max} = 0.01$  нс в лавине образуется в среднем примерно  $10^6$  частиц, а при  $t_{max} = 1$  нс – в среднем около  $8 \cdot 10^7$  частиц. В программе, реализующей методику комбинированного распараллеливания, при количестве частиц в лавине более  $10^6$  намеренно производилось периодическое перераспределение частиц между ядрами сопроцессора и «прикреплённого» CPU ядра.



## Глава 5

Распределённое численное статистическое моделирование и параллельные генераторы псевдослучайных чисел

### Краткое описание материала главы

- В главе 5 представлена методика распределённого численного статистического моделирования, пригодная для реализации на многопроцессорных высокопроизводительных вычислительных системах. Описывается распределительный способ получения псевдослучайных чисел для базового длиннопериодного конгруэнтного генератора, приводятся результаты его тестирования.
- Материал главы нашел отражение в работах [8, 9, 13, 14, 20, 22, 23, 36, 45, 51, 54–57, 59, 63, 65].
- Программный комплекс параллельных генераторов псевдослучайных чисел **PARGENER-MS** описан в разделе 1 Приложения 1.
- Для программного комплекса **PARGENER-MS** получено свидетельство о государственной регистрации [27] (см. описание в Приложении 2). Информацию и коды программ можно найти на интернет-ресурсах [71].

## Глава 5

Существует значительное число публикаций, посвящённых параллельным генераторам псевдослучайных чисел (см. Главу 1 диссертации). Известные способы распределения псевдослучайных чисел по процессорам (параллельным потокам):

- выделение процессорам достаточно длинных непересекающихся отрезков основной последовательности псевдослучайных чисел (т.н. «split»–метод);
- распределение псевдослучайных чисел по процессорам через определённые промежутки («прыжки») основной последовательности, причём каждому процессору соответствует своё значение «прыжка», отличное от других (т.н. «leap-frog»–метод);
- распределение различных псевдослучайных чисел по процессорам с центрального процессора;
- использование различных генераторов на разных процессорах.

**Однако, предлагаемые параллельные генераторы, не нацелены на проведение численного параметрического анализа моделей.**

Как показано в диссертации, «split»–метод удобен для организации распределённых вычислений по методу Монте-Карло, в особенности, для осуществления параметрического анализа вероятностных моделей и реализации различных уровней распараллеливания при моделировании.



Распределительный способ получения псевдослучайных чисел

Для получения базовой последовательности псевдослучайных чисел предлагается использовать следующий 128-битный мультипликативный генератор псевдослучайных чисел:

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

где

$$A \equiv 5^{100109} \pmod{2^{128}}.$$

Для реализации **распределительного способа** («split method» в западной литературе) базовая последовательность  $\{u_n\}$  предварительно разбивается на подпоследовательности длины  $\mu$ , начинающиеся с чисел  $u_{m\mu}$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$ . В зависимости от величины  $\mu$ , можно получить подпоследовательности для вычислительных экспериментов, процессоров, реализаций (то есть отдельных случайных испытаний) и их элементов.

Начальные значения  $u_{k\mu}$  указанных подпоследовательностей получают по формуле

$$u_{(k+1)\mu} \equiv u_{k\mu} A^\mu \pmod{2^r}. \quad (2)$$

Итак, для реализации  $k$ -блока используется подпоследовательность метода вычетов, начинающаяся с

$$\alpha_{km} = u_{km} 2^{-r}.$$

## Глава 5

Введём термины:

- под **массивно-параллельной вычислительной системой** будем понимать систему, состоящую из процессоров аналогичного типа (только CPU) с распределённой памятью, т.е. где у каждого процессора (вычислительного ядра) – своя оперативная память. Процессоры объединены в вычислительные узлы, причём вычислительные узлы могут иметь различную производительность.
- под **гибридной вычислительной системой** будем понимать систему, состоящую из вычислительных узлов, на каждом из которых расположены основные процессоры (CPU) и многоядерные сопроцессоры (например, Intel Xeon Phi или Nvidia GPU).

## Глава 5

При распределении псевдослучайных чисел по подпоследовательностям необходимо учитывать особенности параллельного алгоритма и тип используемой вычислительной системы:

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

Первый и третий варианты соответствуют методологии крупноблочного распараллеливания. Вторым и четвёртым вариантами могут применяться для реализации методологии мелкоблочного распараллеливания.

Для разных вариантов целесообразно использовать иерархическую структуру (т.е. вложенность) подпоследовательностей базовой последовательности генератора, начиная с самой длинной – подпоследовательностей для вычислительных экспериментов (обозначим их длину как  $n_e$ ).

## Глава 5

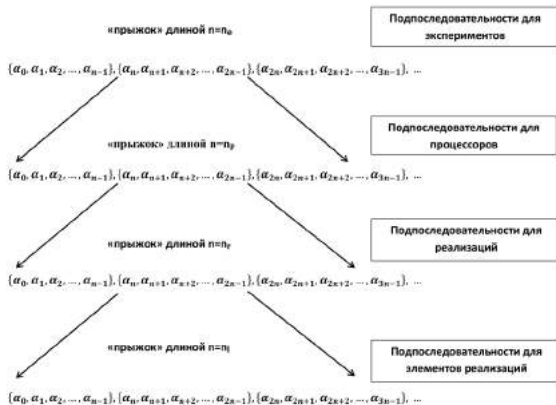


Рис.: Иерархия подпоследовательностей для параллельного генератора. Вариант для массивно-параллельных вычислительных систем для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо на разных процессорах (вычислительных ядрах).



## Глава 5

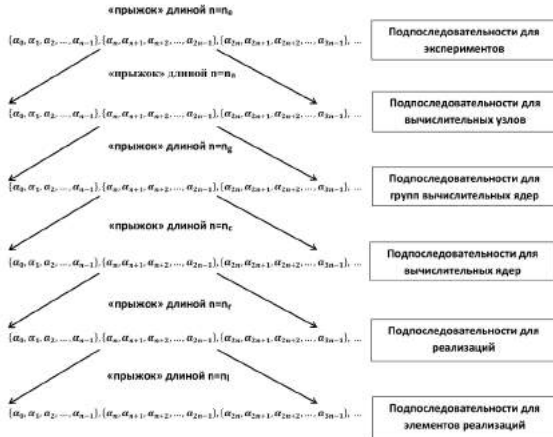


Рис.: Иерархия подпоследовательностей для параллельного генератора. Вариант для гибридных вычислительных систем для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо как на вычислительных ядрах основного процессора, так и на вычислительных ядрах сопроцессора.

## Глава 5

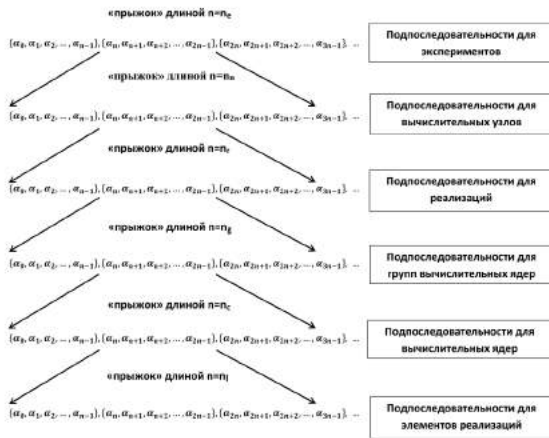


Рис.: Иерархия подпоследовательностей для параллельного генератора. Вариант для гибридных вычислительных систем для случая, когда моделирование каждой реализации осуществляется совместно на вычислительных ядрах основного процессора и на вычислительных ядрах сопроцессора (т.е. на всём вычислительном узле).

## Глава 5

Основные преимущества распределительного способа:

- Различные подпоследовательности базовых псевдослучайных чисел используются не только для каждого вычислительного эксперимента и процессора, но и для каждой реализации и её элементов.
- Распределительный способ коррелирует статистические оценки для различных вариантов задачи, улучшая параметрический анализ результатов, его целесообразно использовать при моделировании элементов реализации, распределение которых различно в разных вариантах задачи.
- Например, при моделировании пространственно неоднородной коагуляции отдельные подпоследовательности используются при выборе пары взаимодействующих частиц и вообще при каждом использовании метода исключения. Это обеспечивало необходимую корреляцию оценок при изменении параметров задачи.
- При моделировании электронной лавины отдельные подпоследовательности используются для моделирования длины свободного пробега для разных значений шага по времени. Это обеспечивало необходимую корреляцию оценок с различными значениями шага по времени.



## Глава 5

Для моделирования элементов реализации полезно также использовать дополнительный быстродействующий 40-битный генератор:

$$v_0 = \tilde{v}, \quad v_n \equiv v_{n-1}B \pmod{2^{40}}, \quad \beta_n = v_n 2^{-40}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3)$$

где  $B \equiv 5^{17} \pmod{2^{40}}$ . Здесь для определения начального значения  $\tilde{v}$  используются старшие 40 бит чисел  $u_n$  начальных чисел подпоследовательностей для реализаций 128-битного генератора, т.е. генератор (3) «рандомизируется» с соответствующим увеличением длины периода.

### Тестирование и сравнительный анализ параллельного генератора

- Численное статистическое моделирование используется, как правило, для приближённого вычисления определённых интегралов по многомерным областям. Ясно, что для эффективной оценки интегралов генератор псевдослучайных чисел должен удовлетворять тесту на многомерную равномерность, т.е. на равномерное заполнение  $n$ -мерных гиперкубов векторами, составленными из  $n$  псевдослучайных чисел.
- С целью проверки параллельного генератора были реализованы тесты  $n$ -мерной равномерности для выборок, которые были получены объединением начальных чисел из заданных ниже подпоследовательностей. Многомерные распределения проверялись на равномерность для  $n = 1, 2, \dots, 8$  по критерию  $\chi^2$  с разбиением по каждой оси на 100 частей для  $n = 2, 3$  и на 8 частей для  $n = 4, \dots, 8$ .
- Был проведён сравнительный анализ 128-битного генератора и других генераторов (в частности, параллельный генератор MT2203 из библиотеки Intel MKL). А именно, осуществлена проверка гипотезы о равенстве соответствующих математических ожиданий в пределах статистической погрешности. Сравнивались также временные затраты при решении различных задач. Выводы: 128-битный генератор и генератор MT2203 из библиотеки Intel MKL эквивалентны по статистическим свойствам и производительности.

### Реализация распределённого статистического моделирования

Методика распределённого численного статистического моделирования состоит в организации моделирования независимых реализаций и вычисления выборочных средних на отдельных процессорах (процессорах-вычислителях), а также периодической передачи осреднения полученных выборочных средних на некотором выделенном процессоре (центральном процессоре-сборщике) по формуле

$$\bar{\zeta}_M = \left( \sum_{m=0}^{M-1} l_m \right)^{-1} \sum_{m=0}^{M-1} l_m \bar{\zeta}^{(m)}, \quad (4)$$

где  $l_m$  – объём выборки, соответствующий  $m$ -у процессору,  $\bar{\zeta}^{(m)}$  – соответствующее  $m$ -у процессору выборочное среднее.

- Для каждого процессора псевдослучайные числа выбираются из непересекающихся подпоследовательностей базовой последовательности  $\{\alpha_k\}$ .
- Вычисления можно проводить на разных процессорах в разное время, объёмы выборки, полученные на процессорах, могут различаться.
- Результаты ранее проведённых вычислений (при условии, что распределение случайной величины не изменяется) можно использовать при осреднении с новыми результатами по формуле (4).

## Глава 5

Ясно также, что в таком случае величина ускорения от распараллеливания на  $M$  процессорах

$$S_L(M) = \frac{T_L(1)}{T_L(M)} \quad (5)$$

будет прямо пропорциональной количеству процессоров  $M$ . Отметим, что при практической оценке ускорения  $S_L$  время  $T_L$  целесообразно измерять по окончании получения данных и сохранения результатов осреднения на диск на центральном процессоре.

Целесообразно производить периодический сбор результатов с разных процессоров, их осреднение и сохранение на диск. Эта процедура полезна, в частности, в следующих целях:

- для контроля над статистической погрешностью в процессе счёта,
- для создания критических точек сохранения программы,
- для гарантированного получения численных результатов в пределах заказанного пользователем времени счёта на суперкомпьютере.

Ясно, что с целью приближения практического ускорения к теоретическому распределённое статистическое моделирование на разных процессорах-вычислителях следует производить в асинхронном режиме. Отправка и получение результатов статистического моделирования также должна осуществляться в асинхронном режиме.

### Оценка эффективности распределённого численного статистического моделирования

**Вычислительные проблемы при реализации распределённого статистического моделирования:**

- оценка эффективности распределённого численного статистического моделирования существенно отличается для случаев сравнительно небольшого количества вычислительных процессоров (порядка нескольких тысяч и менее) и значительного их количества (порядка сотен тысяч и более);
- несмотря на то, что теоретическое ускорение  $S_L$  в формуле (5) при использовании Схемы №1 прямо пропорционально количеству процессоров, при практических расчётах при значительном количестве процессоров (например, порядка десятка тысяч и более) и большом объёме пересылаемых и осредняемых данных характер зависимости  $S_L$  от  $M$  может существенно отличаться от теоретического.

**Задача:** дать рекомендации по оптимальному выбору параметров многоуровневой схемы для достижения наилучшей масштабируемости (эффективности распараллеливания) для конкретной вычислительной системы.

## Глава 5

Описанная далее работа по оценке масштабируемости проводилась в рамках выполнения проекта «Исследования и разработка методов имитационного моделирования функционирования гибридных экзафлопсных вычислительных систем» в рамках Федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 гг.» (государственный контракт №2011-1.4-514-026-006).

В состав коллектива исполнителей по проекту входили Б.М. Глинский, А.С. Родионов, Г.А. Михайлов, С.В. Рогазинский, М.А. Марченко, Д.И. Подкорытов, Д.В. Винс и др.

Использованная при имитационном моделировании мультиагентная система AGNES разработана Д.И. Подкорытовым под руководством А.С. Родионова.

## Глава 5

Рассмотрим две схемы организации организации связей между процессорами:

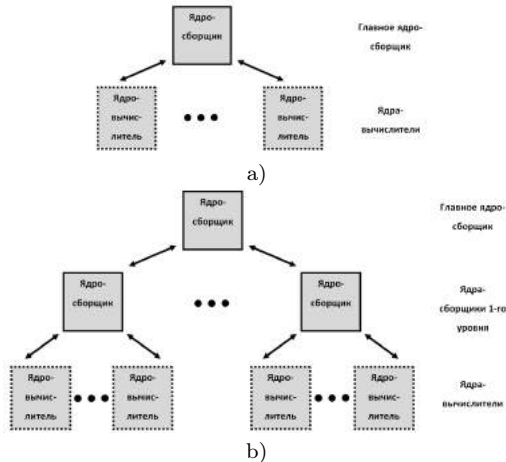


Рис.: а) схема №1 с одним центральным процессором-сборщиком; б) схема №2 с дополнительными процессорами-сборщиками, связанными с центральным процессором-сборщиком.

## Глава 5

Исследовались оба варианта организации обмена данными между процессорами-вычислителями и центральным процессором-сборщиком. Для Схемы №1, для определённости, будем считать, что  $M_1 = 0$ . Предполагается, что  $M \gg M_1$ . Для Схемы 2 процессоры-вычислители делятся на  $M_1$  равных групп, относящихся к дополнительным процессорам-сборщикам.

При использовании Схемы №2 величину ускорения от распараллеливания на  $M$  процессорах с  $M_1$  дополнительными процессорами-сборщиками ( $0 \leq M_1 < M$ ) определим следующим образом:

$$S_L(M, M_1) = \frac{T_L(M_{min}, M_1)}{T_L(M, M_1)},$$

где  $L$  - общее количество реализаций для оценки (4),  $T_L(M, M_1)$  – машинное время на центральном процессоре-сборщике, затраченное на получение и сохранение выборочных средних,  $M_{min}$  – наименьшее количество процессоров, использованных при расчётах.



## Глава 5

- Для задачи исследования схем связи между процессорами эффективным подходом является имитационное моделирование исполнения параллельной программы на суперкомпьютере. Имитационное моделирование проводится с использованием мультиагентной системы AGNES, при этом исходные данные для калибровки имитационной модели получаются с использованием библиотеки PARMONC.
- За основу была взята архитектура кластера НКС-30Т Сибирского суперкомпьютерного центра.
- При имитационном моделировании архитектура вычислительной системы явно в модели не присутствует, поскольку значение имеют лишь задержки на вычисления и обмены. Соответственно этому, задержки либо оцениваются в ходе проведения реальных расчётов на суперкомпьютере. Модель программы представляется взвешенным графом переходов между блоками программы с указанием параллельных ветвей. Временные задержки в блоках определяются на основе измерений, производимых в тестовых прогонах реальных программ.
- Для Схемы №2 процессоры-вычислители делятся на  $M_1 = 10, 20, 100$  групп. На рис. приведена зависимость относительного ускорения  $S_L(M, M_1)$  от общего количества моделируемых процессоров  $M = 1000, 10000, 100000, 500000$  при фиксированных значениях  $M_1$ .

## Глава 5

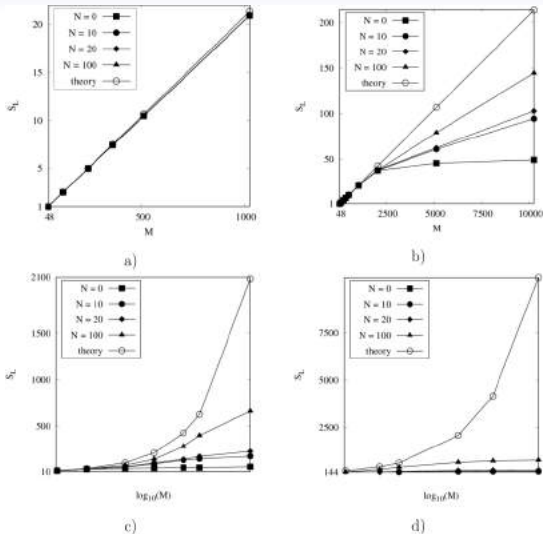


Рис.: Зависимость ускорения  $S_L(M, M_1)$  от  $M$  при разных  $M_1$ : а)  $M = 1000$ , б)  $M = 10000$ , в)  $M = 100000$ , г)  $M = 500000$ . На рис. а), б), в) горизонтальная ось в линейном масштабе, на г) – в логарифмическом.

## Глава 6

Библиотеки PARMONC и MONC, программа AMIKS для реализации распределённого численного статистического моделирования

### Краткое описание материала главы

- В главе 6 представлены универсальные библиотеки программ PARMONC, PARMONC-PC и MONC для реализации распределённого статистического моделирования на многопроцессорных высокопроизводительных вычислительных системах (грид-системах и кластерах с массивно-параллельной и гибридной архитектурами). В библиотеках эффективно применяются распределительный способ получения псевдослучайных чисел и методика распределённого численного статистического моделирования.
- Представлена программа AMIKS для численного анализа стохастических осцилляторов на массивно-параллельных вычислительных системах.
- Материал главы нашел отражение в работах [10, 13, 18, 19, 36, 53, 63].
- Для библиотек и комплекса программ получены четыре свидетельства о государственной регистрации [32–35] (см. описание в Приложении 2). Информацию о библиотеках можно найти на интернет-ресурсах [72, 73].

## Глава 6

Существует значительное число публикаций, посвящённых программному обеспечению для распараллеливания численного статистического моделирования (см. Главу 1 диссертации).

**Однако, предлагаемые подходы, не нацелены на проведение численного параметрического анализа моделей; без согласования с авторами не могут быть внедрены в практику вычислений, в частности, на кластерах ЦКП ССКЦ СО РАН.**

Как показано в диссертации, разработанные библиотеки и программы удобны для организации распределённых вычислений по методу Монте-Карло, в особенности, для осуществления параметрического анализа вероятностных моделей и реализации различных уровней распараллеливания при моделировании.

## Глава 6

### Библиотека PARMONC

- Библиотека PARMONC (сокращение от «PARallel MONte Carlo») представляет собой простой в использовании программный инструмент для реализации распределённого статистического моделирования на суперкомпьютере и не требует от пользователя знания технологий параллельного программирования.
- Библиотека PARMONC предназначена для работы на массивно-параллельных и гибридных вычислительных системах с использованием сопроцессоров Intel Xeon Phi. Разработан также вариант библиотеки PARMONC-PC для персональных компьютеров с многоядерными процессорами.
- Количество процессоров, на которых может быть задействована библиотека PARMONC, практически не ограничено.
- При работе с библиотекой пользователь создаёт подпрограмму на языках C или FORTRAN, которая возвращает реализацию случайного объекта, и передаёт имя подпрограммы библиотечным процедурам. В такой подпрограмме пользователь использует параллельный генератор случайных чисел PARMONC «естественным» образом.

## Глава 6

Перечислим следующие особенности работы библиотеки:

- Осуществляется асинхронная передача выборочных средних с процессоров-вычислителей на процессоры-сборщики.
- Используется многоуровневая система процессоров-сборщиков.
- Производится периодическое сохранение на диск выборочных средних и значений статистической погрешности.
- Возможно возобновление ранее остановленных вычислительных экспериментов с автоматическим учётом их результатов.
- Возможно коррелирование результатов разных вычислительных экспериментов.

## Глава 6

Библиотечные подпрограммы разработаны для следующих вычислительных систем и вариантов моделирования отдельных реализаций:

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



## Глава 6

При использовании основных процедур распределённого статистического моделирования пользователь выбирает номер подпоследовательности для экспериментов в соответствующем аргументе. При исполнении основных процедур вложенные подпоследовательности (подпоследовательности для вычислительных узлов/процессоров, реализаций и элементов реализаций) определяются автоматически.

В зависимости от особенностей параллельного алгоритма и типа используемой вычислительной системы применяется определённый способ распределения псевдослучайных чисел. Например, для массивно-параллельной вычислительной системы для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо на разных процессорах (вычислительных ядрах), по умолчанию, используются следующие вложенные подпоследовательности:

- с длиной  $n_e = 2^{115} \approx 10^{34}$  из базовой последовательности  $\{\alpha_k\}$  – для вычислительных экспериментов,
- с длиной  $n_p = 2^{98} \approx 10^{29}$  из подпоследовательности для вычислительных экспериментов – для процессоров,
- с длиной  $n_r = 2^{43} \approx 10^{13}$  из подпоследовательности для процессоров – для реализаций,
- с длиной  $n_l = 2^{33} \approx 10^{10}$  из подпоследовательности для реализаций – для элементов реализаций.

## Глава 6

Библиотечные подпрограммы и команды, общие для всех вариантов использования:

- Параллельные генераторы псевдослучайных чисел.  
Имена процедур:
  - `rnd128` – параллельный 128-битный генератор (1).
  - `rnd40` – 40-битный генератор (3).
  - `rnd128e1` – 128-битный генератор (1) с выбором номера подпоследовательности для элементов реализации.
- `manaver` – вспомогательная программа для осреднения результатов нескольких отдельных расчётов (т.е. из разных вычислительных экспериментах) одной и той же задачи, сохранённых в разных рабочих каталогах; запускается пользователем из командной строки по окончании расчётов.

## Глава 6

При применении библиотеки на **массивно-параллельной вычислительной системе для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо на разных процессорах (вычислительных ядрах)**, компоненты библиотеки следующие:

- Основные процедуры для запуска распределённого статистического моделирования с целью расчёта выборочных средних, дисперсии и оценок погрешности для случая, когда моделируемый случайный объект (отдельная реализация) – вектор.

Имена процедур: `parmonc1d`, `tparmonc1d`.

- Основные процедуры для запуска распределённого статистического моделирования с целью расчёта выборочных средних, дисперсии и оценок погрешности для случая, когда моделируемый случайный объект (отдельная реализация) – матрица.

Имена процедур:

- `parmonc2df`, `tparmonc2df` – варианты процедур для программ на языке FORTRAN,
- `parmonc2dc`, `parmonc2dc` – варианты процедур для программ на языке C.

## Глава 6

1. Основные процедуры для запуска распределённого статистического моделирования с целью расчёта ковариаций и коэффициентов корреляции сочетаний компонент двух моделируемых случайных векторов (а также расчёт выборочных средних, дисперсии и оценок погрешности для каждого вектора).  
Имена процедур: `parmonc_corr`, `tparamonc_corr`.
2. Основная процедура для запуска распределённого статистического моделирования с целью расчёта выборочных средних, дисперсии и оценок погрешности для случая, когда моделируемая реализация (вектор) зависит от заданных параметров.  
Имена процедур: `parmonc_fnparam`, `tparamonc_fnparam`.
3. Вспомогательные программы (для вызова из командной строки):
  - `genparam` – вспомогательные программы для переопределения множителей «прыжков»  $A(n_e)$ ,  $A(n_p)$ ,  $A(n_r)$ ,  $A(n_l)$  для параллельного генератора (1).

## Глава 6

- При работе библиотеки применяется Схема №2 для организации связей между процессорами. На каждом ядре (процессоре-вычислителе) процессоров на узле производится моделирование реализаций, результаты осреднения на которых пересылаются на одно из ядер процессора того-же узла (процессор-сборщик первого уровня). С этих ядер (дополнительных процессоров-сборщиков) результаты осреднения пересылаются на выделенное ядро (центральный процессор-сборщик) на некотором вычислительном узле.
- Для процедур `parmonc_corr`, `tparmonc_corr` для всех вариантов вычислительных систем при моделировании каждой пары реализаций, для которых оцениваются корреляционные параметры, используются одинаковые подпоследовательности для реализаций.
- Для процедур `parmonc_fnparam`, `tparmonc_fnparam` для всех вариантов вычислительных систем при моделировании реализация для разных значений параметров используются одинаковые подпоследовательности для реализаций.

## Глава 6

### Библиотека PARMONC-PC

Для исполнения на персональных компьютерах с многоядерными процессорами создан специальный вариант библиотеки – PARMONC-PC. Возможна эксплуатация библиотеки с одновременным использованием центрального процессора и ускорителя Intel Xeon Phi. Для распараллеливания счёта в библиотеке используются возможности стандарта OpenMP.

Цели создания библиотеки PARMONC-PC:

- объединение персональных компьютеров в высокопроизводительную грид-систему с использованием библиотеки MONC,
- создание удобной среды для разработки и отладки параллельных программ численного статистического моделирования перед счётом на суперкомпьютере.

Особенности:

- В библиотеке PARMONC-PC реализованы функции и процедуры в том-же составе, с аналогичными названиями, набором аргументов и назначением, что и в библиотеке PARMONC.
- Реализована возможность совместного использования библиотек MONC и PARMONC-PC.

### Библиотека MONC

Цель создания библиотеки MONC (сокращение от «Monte Carlo») - разработка универсальной инструмента для распределённых вычислений по методу численного статистического моделирования на высокопроизводительных грид-системах.

Особенности:

- библиотека реализована для выполнения на персональных компьютерах с современными многоядерными процессорами (а также с многоядерными ускорителями Intel Xeon Phi) и объединенных в сеть,
- библиотека позволяет распределять копии программы пользователя по персональным компьютерам в сети, посылать команды на их независимое исполнение, следить за ходом выполнения заданий, по завершению выполнения копий программы выполнять сохранение файлов с результатами расчётов.

Для библиотеки MONC пользователь должен подготовить «последовательную» программу (исполняемый файл) и входной файл с начальными значениями подпоследовательностей для генератора псевдослучайных чисел.

### Программа AMIKS

Цель создания программы AMIKS – удобный высокопроизводительный программный инструмент для численного анализа систем стохастических дифференциальных уравнений, реализующих различные модели стохастических осцилляторов на высокопроизводительных вычислительных системах.

Базовым компонентом для распределения статистического моделирования является библиотека PARMONC.

Подготовлена к печати монография «Анализ стохастических колебаний методом Монте-Карло на суперкомпьютерах», авторы Артемьев С.С., Корнеев В.Д., Марченко М.А., Якунин М.А., Иванов А.А и Смирнов Д.Д. Издание монографии поддержано РФФИ, планируемый срок выхода: конец 2016 г - начало 2017 г.



## Глава 6

Программа предназначена для численного анализа в следующих областях:

- линейные колебательные контуры,
- нелинейные колебательные контуры,
- СДУ со случайной структурой,
- параметрический анализ странных аттракторов,
- движение летательных космических аппаратов, гироскопы,
- автоколебательные режимы в химических реакциях,
- движение заряженной частицы в электромагнитном поле,
- стохастические уравнения движения жидкости и газа,
- СДУ с пуассоновской составляющей.

## Глава 6

По результатам расчётов могут быть получены оценки следующих функционалов от решения:

- математическое ожидание,
- ковариационная матрица, либо матрица вторых моментов,
- корреляционная функция выделенной компоненты решения для заданного узла сетки  $k_{y_i}(t_n, t_n + \delta)$ ,
- корреляционной функции выделенной компоненты решения  $k_{y_i}(t, \tau)$ ,
- плотности распределения  $p(y_i, t_n)$  выделенной компоненты решения  $y_i(t)$  для заданного узла сетки  $t_n$ ,
- совместной плотности распределения  $p(y_i, y_j, t_n)$  двух выделенных компонент решения  $y_i(t)$  и  $y_j(t)$  для заданного узла сетки  $t_n$ ,
- двумерной плотности распределения  $p(y_i(t_\nu), y_i(t_\mu))$  выделенной компоненты решения  $y_i(t)$  в двух заданных узлах сетки  $t_\nu, t_\mu$ ,
- плотности распределения  $p_\tau(t)$  времени первого выхода решения на границу заданной области,
- частотная интегральная кривая,
- частотный фазовый портрет.

## Глава 6

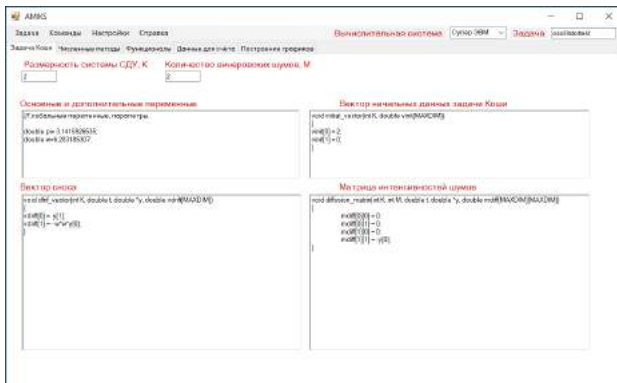
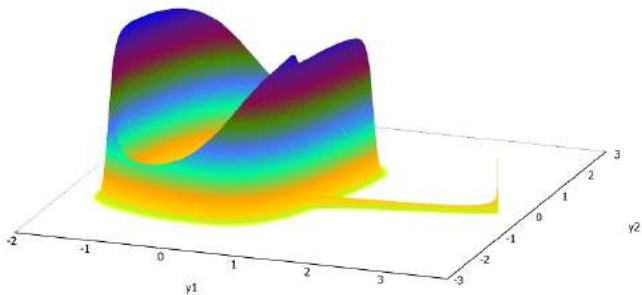


Рис.: Окно программы AMKS. Форма для ввода параметров задачи Коши.

## Глава 6



**Рис.:** Расчёт частотного фазового портрета с помощью программы AMIKS. Задача для СДУ со случайной структурой.

## Приложения

## Приложения

- В Приложении 1 приводится описание разработанных параллельных вычислительных программ и библиотек.
- В Приложении 2 даётся описание полученных свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.
- В Приложении 3 приводятся копии актов о внедрении научных и практических результатов диссертации.

## Заклучение

## Заключение

С целью дальнейшего развития результатов и методов диссертации предлагаются следующие перспективные направления исследований:

- улучшение статистических свойств разработанного параллельного генератора базовых псевдослучайных чисел путём его комбинирования с физическими генераторами с применением технологии векторизации;
- разработка универсальных программных продуктов на основе библиотеки PARMONC для реализации методики распределённого численного статистического моделирования на новых высокопроизводительных вычислительных системах с гибридной архитектурой, создание технологии загрузки максимального числа процессоров вычислительной системы по мере их освобождения от решения других задач;
- развитие методов весового моделирования по ценности для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов и их комбинирование с методом многократного расщепления с целью уменьшения вычислительной трудоёмкости;



## Заключение

- создание новых вероятностных моделей пространственно неоднородной коагуляции с учётом граничных условий, диффузии и химических реакций и реализующих такие модели экономичных параллельных алгоритмов метода прямого статистического моделирования, разработка методики прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, в частности, характеристик дисперсной системы для областей с малой концентрацией частиц;
- уточнение вероятностной модели развития электронных лавин в газе с учётом собственного поля электронов и ионов, течения газа и химических реакций, разработка экономичных параллельных алгоритмов для вычислительных систем с гибридной архитектурой.

БОЛЬШОЕ СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!