

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»

Марченко Михаил Александрович

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

13 сентября 2016 г.

Структура диссертации

1. Введение.
2. Глава 1 «Обзор методов численного статистического моделирования кинетических процессов и способов их распараллеливания».
3. Глава 2 «Численное статистическое моделирование при решении диффузионных задач с использованием распределённых вычислений».
4. Глава 3 «Численное статистическое моделирование пространственно неоднородной коагуляции с использованием распределённых вычислений».
5. Глава 4 «Численное статистическое моделирование процесса переноса заряженных частиц с использованием распределённых вычислений».
6. Глава 5 «Распределённое численное статистическое моделирование и параллельные генераторы псевдослучайных чисел».
7. Глава 6 «Библиотеки PARMONC, PARMONC-PC и MONC, программа AMIKS для реализации распределённого численного статистического моделирования».
8. Приложения 1, 2, 3.
9. Заключение.

Актуальность темы исследований

- Вероятностные имитационные модели и численное статистическое моделирование широко используются для численного анализа задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц.
- Современное развитие вычислительной техники, у которой число ядер исчисляется сотнями тысяч, выдвигает на первый план методы численного статистического моделирования, хорошо адаптированные к параллельным вычислениям.
- Использование методов численного статистического моделирования особенно эффективно для решения задач математической физики с учётом случайных параметров.
- **Вопросы разработки подробных и адекватных вероятностных моделей кинетических процессов, принципиально рассчитанных на использование суперкомпьютеров, являются актуальными и недостаточно исследованными; также требуют дальнейшего развития методы численного параметрического анализа вероятностных моделей.**

Положения, выносимые на защиту

- **№1.** Разработаны и исследованы эффективные алгоритмы численного статистического моделирования для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов, а именно, вероятности недостижения границы области траекториями и полной концентрации траекторий в точке за заданное время.
- **№2.** Разработаны и исследованы вероятностная модель пространственно неоднородной коагуляции и реализующий её экономичный параллельный алгоритм метода прямого статистического моделирования.
- **№3.** Разработаны и исследованы вероятностная модель процесса развития электронных лавин в газе и реализующий её экономичный параллельный алгоритм численного статистического моделирования, в котором эффективно реализуется моделирование траекторий ветвящихся случайных процессов.

Положения, выносимые на защиту

- **№4.** Разработаны и исследованы длиннопериодные параллельные генераторы псевдослучайных чисел и методика распределённого численного статистического моделирования, обеспечивающие возможность проведения коррелированных расчётов и численного параметрического анализа вероятностных моделей.
- **№5.** Разработана имитационная модель исполнения программы распределённого численного статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах, с её использованием получены оценки масштабируемости программ на большое число процессоров.
- **№6.** Разработаны универсальные библиотеки распределённого численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем и параллельные прикладные программы для решения задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц.

Публикации

Материалы диссертации представлены в 63 печатных работах, свидетельствах о регистрации программ для ЭВМ. 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.

Перечень разработанных программ и библиотек:

1. PARMONC – библиотека для суперкомпьютеров;
2. PARMONC-PC – библиотека для персональных компьютеров;
3. MONC – библиотека для GRID-систем;
4. PARGENER-MC – программный комплекс параллельных генераторов;
5. BOUNDARY-MC – для прецизионного расчёта вероятности недостижения границы области за заданное время;
6. CONCENTRATION-MC – для прецизионного расчёта полной концентрации траекторий в точке за заданное время;
7. COAGULATION-MC – для моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции;
8. ELSHOW – для моделирования электронных лавин;
9. AMIKS – для численного анализа стохастических осцилляторов.

Есть также акты внедрения результатов диссертации.

Ключевая терминология

Пусть задано приближение функционала $\varphi \in R$ математическим ожиданием случайной величины ζ , 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**.

Каждая реализация $\zeta^{(i)}$ моделируется с использованием псевдослучайных чисел: $\zeta^{(i)} = \zeta^{(i)}(\alpha_1, \dots, \alpha_k)$, $k = k(i)$.

Вероятностной моделью будем называть алгоритм моделирования (имитации) случайного объекта, т.е. реализаций $\zeta^{(i)}$.

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 детерминированной погрешности ε_{det} , то необходимое число реализаций имеет следующий порядок:

$$L \sim D\zeta \varepsilon_{det}^{-2}$$

Трудоемкость статистического моделирования характеризуется величиной

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

где τ_{ζ} – среднее машинное время, затраченное на получение значения ζ .

Глава 2

Численное статистическое моделирование при решении
диффузионных задач с использованием распределённых
вычислений

Глава 2

- 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 $10^{-8} \div 10^{-6}$, могут иметь катастрофические последствия.

Вычислительные проблемы:

- наступление нужного события происходит для единичных испытаний из значительного общего их числа; такие функционалы являются **плохо статистически определёнными**.
- при решении практических задач реализация численных алгоритмов принципиально связана с применением **многопроцессорных систем**.

Глава 2

Результаты других авторов (упомянуты в обзоре в Главе 1) получены в следующих областях:

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

Однако, в литературе мало освещаются вопросы применимости различных методов для решения конкретных задач, в частности, при изменении их параметров. Не приводятся также практические рекомендации по численному параметрическому анализу диффузионных вероятностных моделей.

Новизна наших результатов:

- для рассмотренных задач построены новые приближения к функции ценности, с их помощью построены эффективные весовые оценки; для задачи оценки вероятности проведён сравнительный параметрический анализ оценки прямого моделирования, оценки метода расщепления и весовой оценки; для задачи оценки концентрации 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.
- разработаны параллельные программы **BOUNDARY-MC** и **CONCENTRATION-MC**.

Глава 2

Пусть m -мерный диффузионный процесс $y(\cdot)$ задан системой СДУ:

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

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.

Рассматривается задача прецизионного вычисления следующих функционалов на траекториях решения СДУ:

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

где τ – момент поглощения траектории $y(\cdot)$, функции $h(\cdot)$ и $\psi(\cdot)$ – кусочно-непрерывны в R^m . Замена в интеграле точной траектории на приближённую позволяет построить **оценку прямого моделирования или аналоговую оценку**.

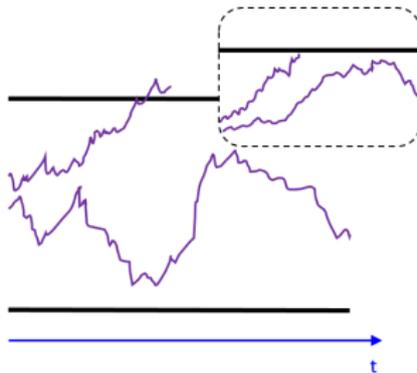
Рассмотрим две постановки задачи параметрического анализа трудоёмкости статистических оценок:

- в рамках **дискретной постановки** для приближённой траектории фиксирован шаг Δt ; трудоёмкость исследуется при $T \rightarrow +\infty$;
- в рамках **непрерывной постановки** фиксировано значение правой границы T ; трудоёмкость исследуется при $\Delta t \rightarrow 0$.

Глава 2

Обозначим через $p(T, 0, y_0)$ **вероятность недостижения случайным процессом $y(\cdot)$ границы Γ области Ω за время от t до T при условии, что случайный процесс начинается в точке $y_0 \in \Omega$ в момент времени 0.**

При больших T оценка вероятности следующая: $p(T, 0, y_0) \approx \exp(-\rho T)$, $\rho \geq 0$.



При больших T трудоёмкость аналоговой оценки вероятности

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

имеет порядок величины

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

т.о. её нецелесообразно использовать на практике.

Глава 2

Рассмотрим моменты времени $0 \leq T_1 < T_2 < \dots < T_k \leq T$ (точки расщепления), вектор с натуральными компонентами $\bar{n} = (n_1, n_2, \dots, n_k)$ и определим случайную величину $\zeta_S(k, \bar{n})$ (**расщеплённую оценку**) следующим образом: в точках расщепления T_i траектория разделяется (расщепляется) на n_i условно-независимых траекторий, вклад в оценку для каждой такой новой траектории учитывается с весом $1/n_i$.

Для дискретной постановки задачи трудоёмкость расщеплённой оценки имеет порядок величины $C(\zeta_S) \sim T^2$.

Пусть траектории моделируются согласно новой переходной плотности

$$g_{t_i}(y_i \rightarrow y_{i+1}), \text{ тогда } \varphi = \mathbf{E}\zeta_W = \mathbf{E} \left[\prod_{i=0}^{n-1} q_{t_i}(y_i, y_{i+1}) \right], \text{ где}$$

$$q_{t_i}(y_i, y_{i+1}) = k(y_i, y_{i+1})/g_{t_i}(y_i \rightarrow y_{i+1}), \quad k(y_i, y_{i+1}) = r_E(y_i \rightarrow y_{i+1})\chi_\Omega(y_{i+1})$$

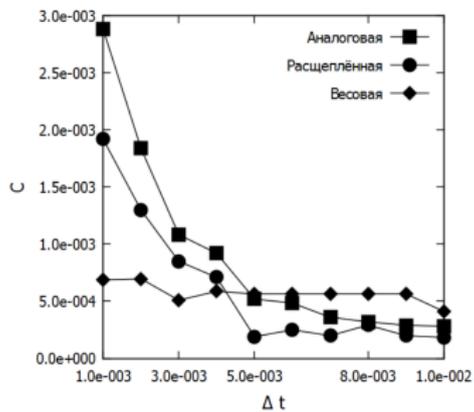
Весовую оценку ζ_W можно представить в рекуррентном виде: $\zeta_W(t, y) = h(t, y) + q_t(y, y_1)\zeta_W(t_1, y_1)$, где $\zeta_W(t, y)$ - весовая оценка для траекторий, начинающихся в точке y в момент времени t .

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

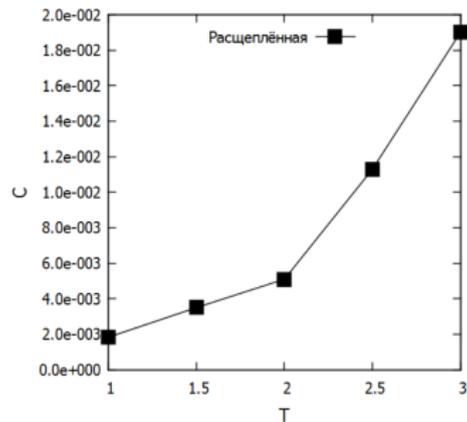
Для непрерывной постановки задачи трудоёмкость весовой оценки имеет порядок величины $C(\zeta_W) \sim T^2\varphi^{-2}$.

Глава 2

В расчётах использовалась программа BOUNDARY-МС и библиотека PARMONC:



а)



б)

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

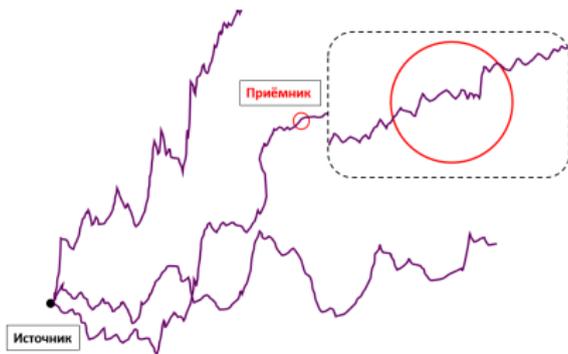
Глава 2

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

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

где Ω_c – шар радиуса r_c с центром в точке y_c , V_c – объём шара.

Функционал $\Phi(T, y_c)$ оценим с помощью математического ожидания от аналоговой оценки: $\Phi \approx \varphi = E \zeta_D(0, y_0) = E \sum_{i=0}^n w(y_i) \Delta t$.



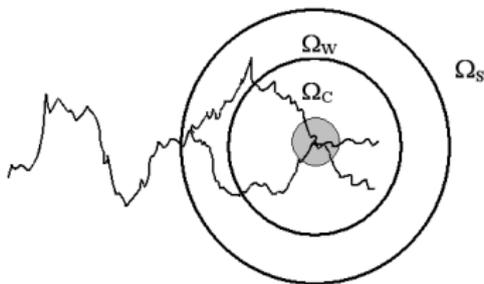
Трудоёмкость аналоговой оценки имеет порядок величины $C(\zeta_D(z)) \sim C \Delta t^{-1}$, т.о. её нецелесообразно использовать на практике.

Глава 2

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

Разработана методика комбинирования прямого моделирования, методов расщепления и моделирования по ценности:

- из источника начинается прямое моделирование траектории;
- при попадании траектории в шар Ω_S – переход к методу расщепления, т.о. начиная с точки $z = (t, y)$ строятся s условно-независимых оценок $\zeta^{(i)}(z)$, $i = 1, \dots, s$ и для каждой из них сначала производится прямое моделирование;
- при попадании каждой из расщеплённых траекторий в шар Ω_w происходит переход на весовое моделирование, а при выходе из Ω_w опять происходит переход на прямое моделирование.



Глава 2

С использованием программы CONCENTRATION-МС и библиотеки PARMONC показано, что комбинированный алгоритм позволяет уменьшить трудоемкость на порядок по сравнению с прямым моделированием.

Для СДУ с постоянными коэффициентами $dy(t) = Adt + Idw(t)$, $y(0) = 0$ известно точное значение концентрации; рассматривалось три варианта коэффициентов при $T = 10$, соответственно: 1) $\Phi(T, y_c) = 2.27 \cdot 10^{-4}$, 2) $\Phi(T, y_c) = 2.09 \cdot 10^{-4}$, 3) $\Phi(T, y_c) = 3.2 \cdot 10^{-5}$.

Шаг $\Delta t = 10^{-3}$; относительная статистическая погрешность оценки $\leq 1\%$.

Аналоговая оценка

СДУ	$E\zeta_D \pm \sqrt{D\zeta_D/N}$	$D\zeta_D$	$t(\zeta_D)$	$C(\zeta_D)$
1)	$2.32 \cdot 10^{-4} \pm 2.96 \cdot 10^{-6}$	$8.1 \cdot 10^{-4}$	$5.85 \cdot 10^{-3}$	$4.74 \cdot 10^{-6}$
2)	$2.02 \cdot 10^{-4} \pm 3.03 \cdot 10^{-6}$	$8.5 \cdot 10^{-4}$	$5.25 \cdot 10^{-3}$	$4.46 \cdot 10^{-6}$
3)	$3.3 \cdot 10^{-5} \pm 9.42 \cdot 10^{-7}$	$8.2 \cdot 10^{-5}$	$5.48 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-7}$

Комбинированная оценка

СДУ	$E\zeta_{SW} \pm \sqrt{D\zeta_{SW}/N}$	$D\zeta_{SW}$	$t(\zeta_{SW})$	$C(\zeta_{SW})$
1)	$2.19 \cdot 10^{-4} \pm 7.5 \cdot 10^{-7}$	$5.2 \cdot 10^{-6}$	$1.68 \cdot 10^{-2}$	$8.75 \cdot 10^{-8}$
2)	$1.98 \cdot 10^{-4} \pm 7.28 \cdot 10^{-7}$	$4.9 \cdot 10^{-6}$	$1.93 \cdot 10^{-2}$	$9.47 \cdot 10^{-8}$
3)	$2.97 \cdot 10^{-5} \pm 2.4 \cdot 10^{-7}$	$5.5 \cdot 10^{-7}$	$1.19 \cdot 10^{-2}$	$6.55 \cdot 10^{-9}$

Глава 3

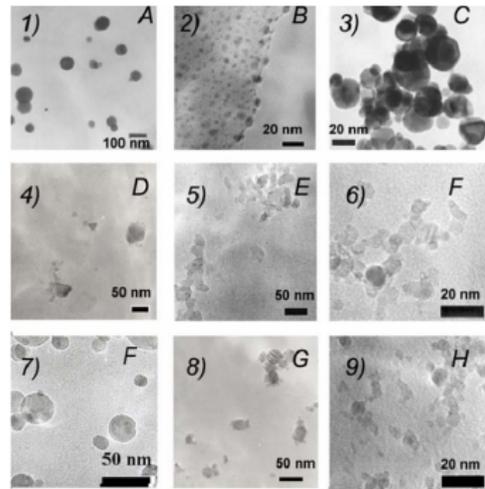
Численное статистическое моделирование пространственно
неоднородной коагуляции с использованием распределённых
вычислений

Глава 3

Задачи моделирования пространственно неоднородной коагуляции чрезвычайно актуальны при изучении атмосферных аэрозолей, образования части сажи и оксидов в пламенном синтезе и др. областях.



a)



b)

a) пирогенный синтез наночастиц, b) микрофотографии наночастиц, полученных с помощью пламенного синтеза

Глава 3

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

- разработаны полуэвристические (имитационные) т.н. ячеечные алгоритмы статистического моделирования пространственно неоднородной коагуляции,
- разработаны конечно-разностные и конечноэлементные 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»);
- 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;
- разработана параллельная программа COAGULATION-MS.

Глава 3

В пространственно-временной области $\Omega \times (0, T]$, где **вычислительная область** $\Omega \subset R^3$, рассмотрим систему нелинейных уравнений, описывающих процесс пространственно неоднородной коагуляции (**уравнение коагуляции**):

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

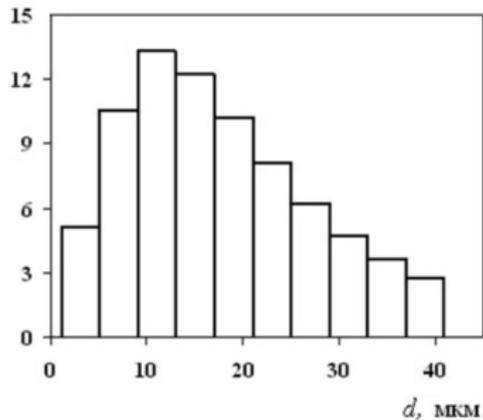
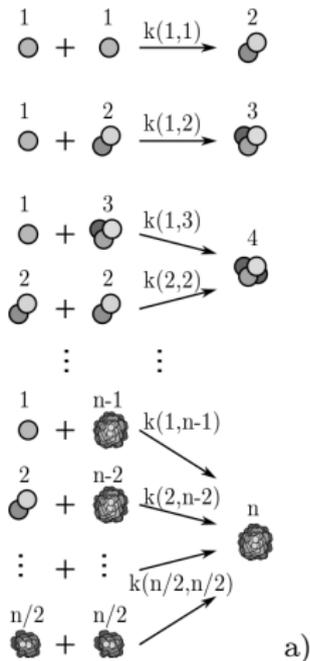
$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \operatorname{div}(vc_i) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K(x, i-j, j)c_{i-j}c_j - c_i \sum_{j=1}^{\infty} K(x, i, j)c_j, \quad i \geq 2,$$

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

Здесь

- $c_i = c_i(t, x)$, $i = 1, 2, \dots$ – концентрация i -меров в момент t в точке x ;
- $v(x)$ – заданное поле скоростей;
- $K(x, i, j)$ – заданное ядро коагуляции;
- $c_i^{(0)}(x)$, $i = 1, 2, \dots$ – начальная концентрация i -меров.

Глава 3



b)

Схемы: а) процесс коагуляции в пространственной точке, б) распределение частиц по размерам в пространственной точке.

Глава 3

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

1. область Ω разбивается на малые непересекающиеся подобласти $\Omega_1, \dots, \Omega_S$ («ячейки») и регуляризованное ядро коагуляции записывается следующим образом:

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

где ρ_s – объём Ω_s , $\chi_{\Omega_s}(x)$ – индикаторная функция области Ω_s , x_s^* – некоторая точка из Ω_s ;

2. считается, что взаимодействие происходит при попадании пары частиц внутрь шара заданного радиуса r , в таком случае

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

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

Допустим, что для ядра коагуляции существует мажоранта:

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

Для каждого из способов регуляризации ядра коагуляции записывается соответствующая мажоранта.

Глава 3

На временных подынтервалах длиной Δt процессы коагуляции частиц и их переноса рассматриваются отдельно («расщепление» по физическим процессам).

Метод «мажорантной частоты» обеспечивает линейную зависимость времени счёта от числа тестовых частиц.

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

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

$$\hat{\nu} = (2N_0)^{-1} \sum \hat{K}^{\rho}(p_i, p_j) = (2N_0\rho)^{-1} N(N-1) \hat{K}.$$

Установка $t_c = t_c + \tau$; 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 фиктивном акте состояние ансамбля не изменяется. При реальном акте выбранная пара (p_i, p_j) образует одну частицу и состояние ансамбля меняется:

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

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

Вычислительная проблема: в практических задачах начальное количество частиц N_0 настолько велико, что выборочные значения ансамбля частиц ξ не помещаются в памяти одного процессора.

Выход – распараллеливание моделирования, когда отдельный ансамбль частиц будет моделироваться совместно на M процессорах ($M > 1$).

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

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

Тестовые частицы сортируются по процессорным областям и в каждой $\hat{\Omega}_m$ моделируется эволюция 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.

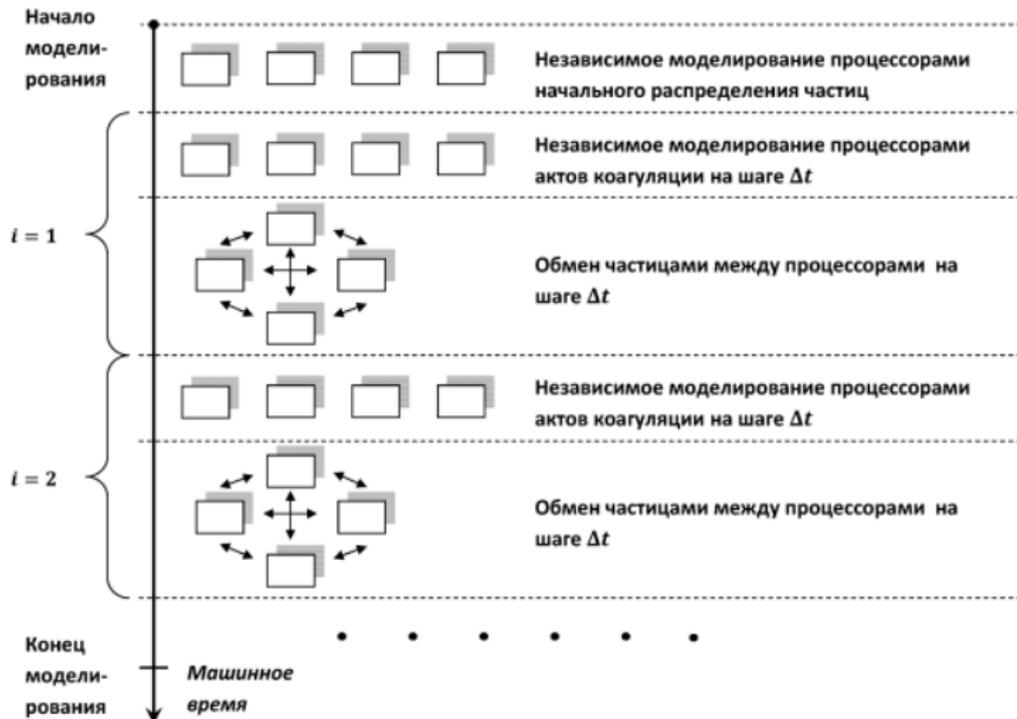
Запишем мажорантную частоту в следующем виде:

$$\hat{\nu} = \sum_{m=1}^M \hat{\nu}_m, \quad \hat{\nu}_m = \frac{1}{2N_0} \sum_{i \neq j} \hat{K}^\rho(p_i, p_j),$$

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

Глава 3

Схема параллельного алгоритма:



Глава 3

При отображении алгоритма моделирования на параллельную вычислительную систему будем придерживаться такой стратегии: **с увеличением количества процессоров остальные параметры алгоритма меняются так, что уменьшается погрешность вычислений.**

Перечислим параметры параллельного алгоритма:

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

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

Относительной эффективностью распараллеливания назовём функцию:

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

Здесь при моделировании значения параметров $\bar{p}, N_0, \Delta t, \rho$ одинаковы для случаев $M = 1$ и $M > 1$.

Производится теоретический анализ среднего времени моделирования одной реализации ансамбля

$$t_1 = E(t^{(i)} + t^{(c)} + t^{(e)}),$$

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.

Глава 3

Введем нелинейную 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.

Для оценки $t_i^{(e)}$ рассмотрим верхнюю границу как наихудший (в плане времени выполнения) вариант обмена данными:

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

Теоретические выводы: 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 $\Phi \sim M^{d-r} \rightarrow \infty$.

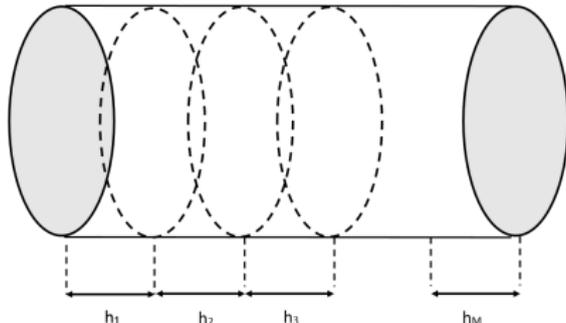
Глава 3

Для проверки теоретических выводов рассмотрим следующую тестовую задачу:

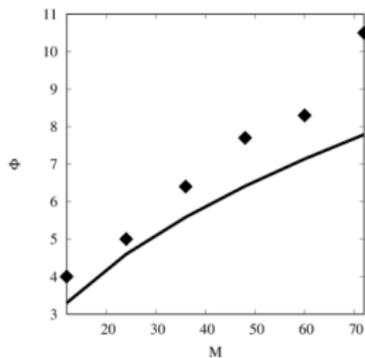
- область Ω является цилиндром, чья ось параллельна оси OX , длина $L = 10$, радиус $R = 1$, объём $V = \pi R^2 L$;
- ядро коагуляции $K(i, j, \bar{x}) \equiv 1$ для всех $\bar{x} \in \Omega$;
- поле скоростей направлено вдоль оси OX : $\bar{v}(\bar{x}) = (v_x(\bar{x}), 0, 0)$;
- начальная концентрация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

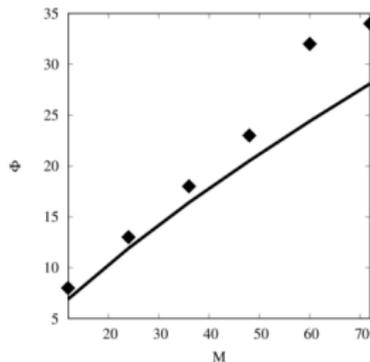
Способ «разрезания» вычислительной области на процессорные области:



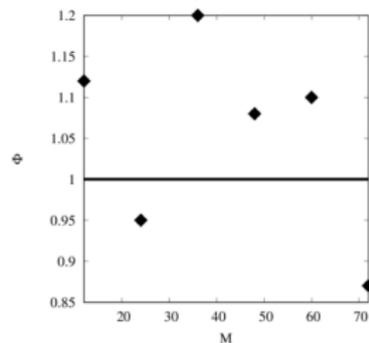
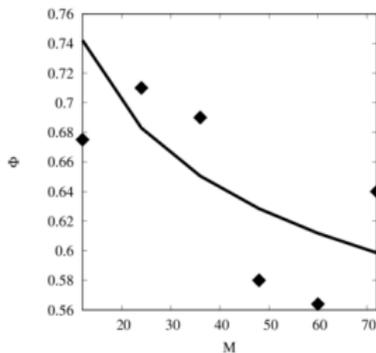
Глава 3



a)



b)



Зависимость величины эффективности Φ от количества процессоров M для случаев а) $d = 0.7$, б) $d = 1.0$, в) $d = 0.1$, д) $d = 0.22$.

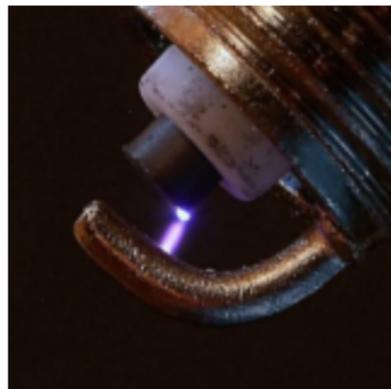
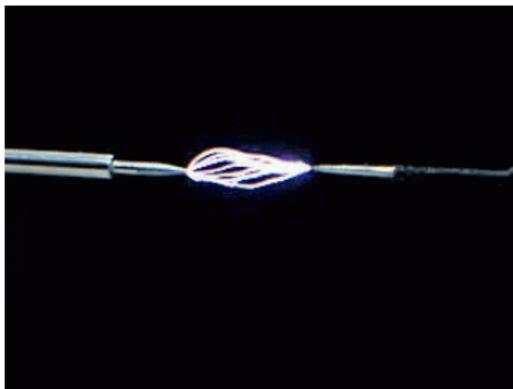
Глава 4

Численное статистическое моделирование процесса переноса заряженных частиц с использованием распределённых вычислений

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.

Постановка появилась при выполнении проекта по моделированию разрядов в плазматроне в рамках Интеграционного проекта СО РАН №126 «Импульсные разряды в газах высокого давления и моделирование газоразрядных, плазмохимических и газодинамических процессов методом Монте-Карло».



Глава 4

Разработанные другими авторами 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).

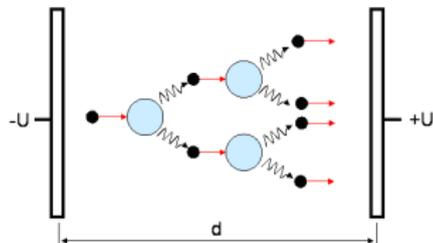
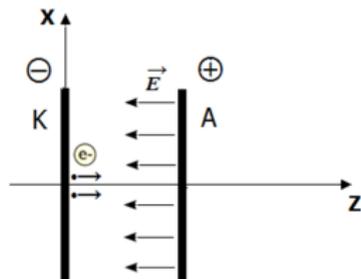
Новизна наших результатов:

- построена вероятностная модель развития лавин на основе ветвящихся случайных процессов;
- с помощью применения методики коррелированных расчётов произведен обоснованный выбор её параметров;
- применена методика распределённых вычислений;
- разработана параллельная программа **ELSHOW**.

Глава 4

Физическая постановка:

- в трёхмерном пространстве рассматривается система с внешним электрическим полем с постоянной напряжённостью $\mathbf{E} = (0, 0, -E_z)$;
- расстояние между катодом и анодом d и заполнено азотом N_2 с концентрацией N и давлением p ;
- задаются сечения упругого рассеяния, возбуждения и ионизации – всего 24 типа взаимодействий.



Алгоритм построения реализации ансамбля:

- 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} или расстояния d ; с этой целью делаются одинаковые шаги Δt по времени и используется лексикографическая схема.

Глава 4

В ходе моделирования в определённые моменты времени строятся оценки следующих функционалов:

- количество частиц $n(t_i)$;
- положение центра масс $r_c(t_i) = (\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle z \rangle)$, где

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

- 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 плотности частиц;
- коэффициенты продольной D_L и поперечной диффузии D_T ;
- частота ионизации ν_{ion} (зависимость от времени количества частиц);
- коэффициент ударной ионизации α_{ion} (зависимость количества частиц в лавине от пройденного ею расстояния d).

Глава 4

Вычислительные проблемы:

- число обрабатываемых частиц в дереве (и машинное время не его обработку) растёт по экспоненциальному закону с ростом t_{max} :

$$t_1 = C_1 n_0 \exp(C_2 t_{max}), \quad C_1, C_2 > 0,$$

где n_0 – число первичных частиц при $t = 0$.

- большая величина дисперсии оценок функционалов.

Способы уменьшения времени счета:

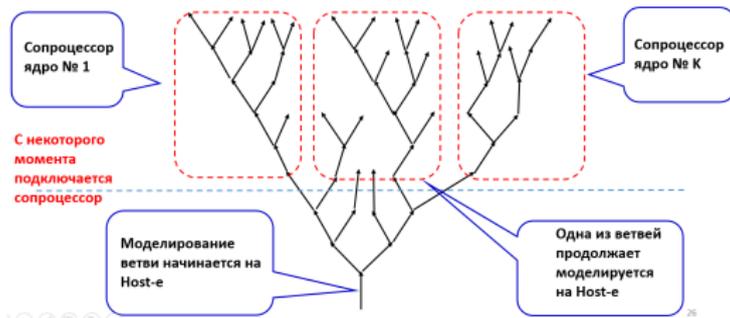
- использование различных методов укрупнения (когда моделируемая частица представляется в виде облака, имеющего в себе несколько элементарных частиц) – **это приводит к снижению точности**,
- применение «русской рулетки»: на определённых шагах по времени производится процедура удаления электронов с вероятностью P_u из рассмотрения; для оставшихся частиц статистический «вес» умножается на величину $1/(1 - P_u)$ – по грубой оценке, **среднее время моделирования одной реализации уменьшается в $(1 - P_u)$ раз, но при этом дисперсия оценки функционалов увеличивается в $1/(1 - P_u)^2$ раз**;
- применение параллельных вычислений.

Задача: разработать эффективную реализацию параллельного алгоритма.

Глава 4

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

При наличии достаточного количества ядер можно использовать более глубокое распараллеливание, выделяя вложенные вычислительные блоки в алгоритме – **мелкоблочное распараллеливание**: при накоплении достаточно большого количества частиц моделирование ветвей дерева, происходящих от них, можно распределить по свободным ядрам; для каждой такой ветви учитывается её вклад в оценку функционала.



Комбинированное распараллеливание – использование крупно- и мелкоблочного распараллеливания на гибридной вычислительной системе.

Глава 4

Ускорение от применения комбинированного распараллеливания:

$$S \approx M \frac{1 + \alpha\beta(N + 1)}{1 + \beta}, \quad \beta = M_2/M_1,$$

где M_1 – число ядер основных процессоров, на которых производится крупно-блочное распараллеливание, M_2 – число ядер основных процессоров, к которому «прикреплено» по N ядер сопроцессора, α – отношение производительности ядра сопроцессора и основного процессора.

Для сравнения методик крупноблочного и комбинированного распараллеливания проводились расчёты на кластере МВС-10П в МСЦ РАН (на каждом узле – два 8-ми ядерных процессора Intel Xeon E5-2690 и два 61-ти ядерных сопроцессора Intel Xeon Phi SE10X). Использовались программа ELSHOW и библиотека PARMONC.

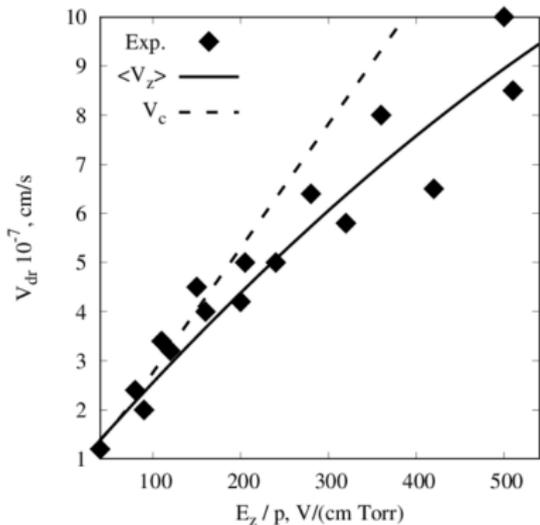
Результаты расчётов:

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

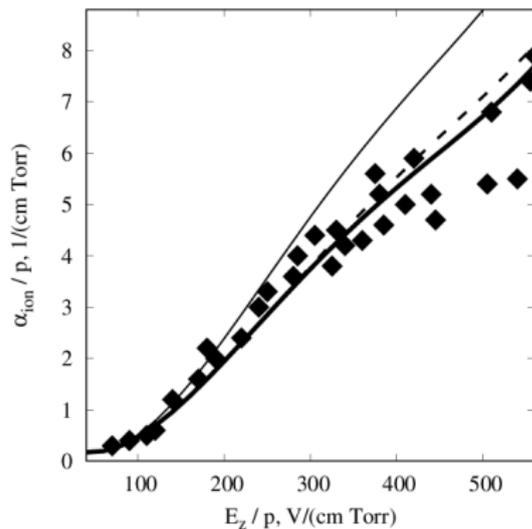
Выигрыш от применения комбинированного распараллеливания ≈ 4.4 .

Глава 4

Сравнение с известными экспериментальными и расчётными данными.



a)

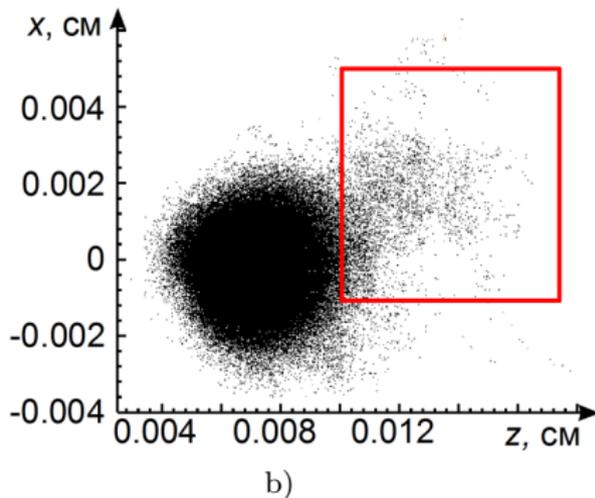
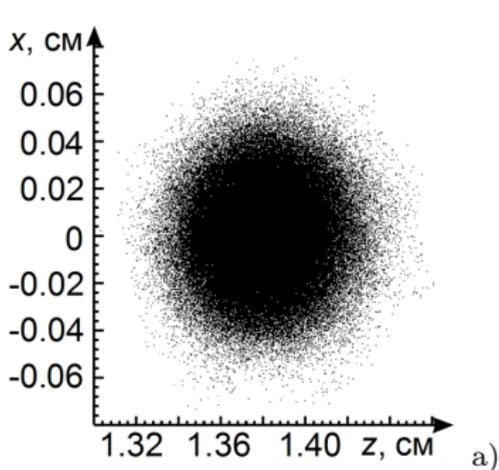


b)

- a) Зависимость скорости дрейфа от E_z/p ; сплошная кривая – $\langle V_z \rangle$; пунктир – V_c ; ромбики – экспериментальные данные;
- b) 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 – «убегающих» электронов (выделено красным прямоугольником).



Сечение реализации электронной лавины в плоскости XZ:

a) $E/p = 50 \text{ V} / (\text{cm Torr})$,

b) $E/p = 500 \text{ V} / (\text{cm Torr})$

Глава 5

Распределённое численное статистическое моделирование и параллельные генераторы псевдослучайных чисел

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.

Глава 5

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

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

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 μ , начинающиеся с чисел $u_{m\mu}$, $m = 0, 1, 2, \dots$

В зависимости от величины μ , можно получить подпоследовательности для вычислительных экспериментов, процессоров, реализаций (то есть отдельных случайных испытаний) и их элементов.

В отличие от обычного способа распределения псевдослучайных чисел в порядке обращения к генератору, он обеспечивают малое изменение результатов моделирования при малом изменении параметров задачи, улучшая параметрический анализ результатов.

Глава 5

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

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

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

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

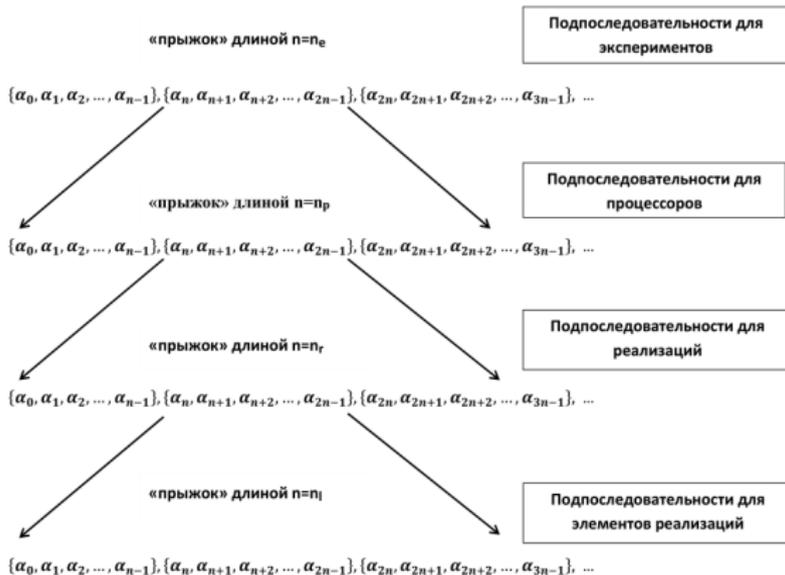
Проверка параллельного генератора: проведены тесты многомерной равномерности по критерию χ^2 , проделаны расчёты задач с известным аналитическим решением, выполнен сравнительный анализ с другими генераторами; генератор используется больше 10 лет.

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

1. массивно-параллельные и гибридные вычислительные системы;
2. моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо на разных процессорах;
3. моделирование каждой реализации осуществляется совместно на нескольких процессорах.

Глава 5

Целесообразно использовать иерархическую структуру (т.е. вложенность) подпоследовательностей базовой последовательности генератора, начиная с самой длинной – подпоследовательностей для вычислительных экспериментов и заканчивая подпоследовательностью для элементов реализаций, например:



Вариант для массивно-параллельных вычислительных систем для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо на разных процессорах (вычислительных ядрах).

Глава 5

Распределение моделирования реализаций по процессорам с осреднением результатов на центральном процессоре-сборщике по формуле

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

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

Важно использовать предлагаемый распределительный способ получения псевдослучайных чисел.

Целесообразно производить периодический сбор результатов (в асинхронном режиме) с разных процессоров, их осреднение и сохранение на диск:

- 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.

Глава 5

Рассмотрим две схемы связей между процессорами.

Схема №1 с одним центральным процессором-сборщиком:

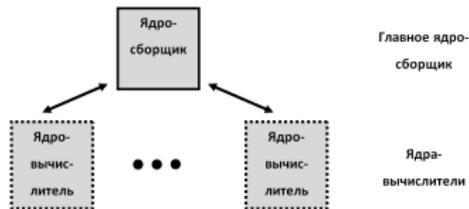
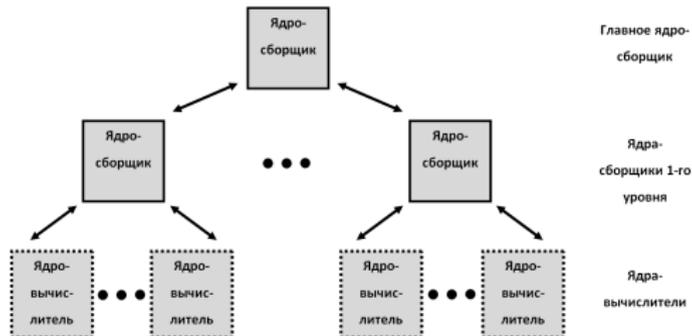


Схема №2 с дополнительными процессорами-сборщиками, связанными с центральным процессором-сборщиком:



Схему №2 можно легко реализовать на многопроцессорных вычислительных системах с распределённой памятью.

Глава 5

Следующие результаты получены в ходе выполнения научно-исследовательских работ по государственному контракту №07.514.11.4016 от 19.08.2011 г. (проект «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.»

Для схемы №1 для относительно небольшого количества процессоров ($M \sim 10^3$) ускорение линейно по M :

$$S_L(M) = T_L(1)/T_L(M) \sim M$$

Для большого количества количества процессоров ($M \sim 10^5 \div 10^6$ и более) для схемы №1 это может быть не так!

Выход: использовать схему №2 с дополнительными процессорами-сборщиками.

Задача: дать рекомендации по выбору оптимального количества дополнительных процессоров-сборщиков M_1 для достижения наилучшей эффективности распараллеливания для конкретной вычислительной системы.

Глава 5

Имитация исполнения программ распределённого численного статистического моделирования:

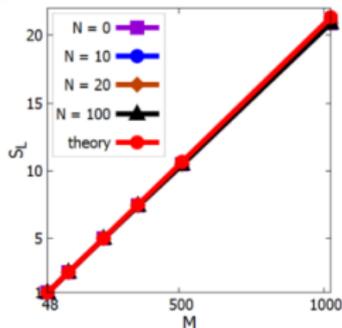
- имитационное моделирование проводится с использованием мультиагентной системы AGNES [1];
- исходные данные для калибровки имитационной модели получаются с использованием библиотеки PARMONC.

[1] Глинский Б.М., Родионов А.С., Марченко М.А., Подкорытов Д.И., Винс Д.В. Агентно-ориентированный подход к имитационному моделированию суперЭВМ экзафлопсной производительности в приложении к распределённому статистическому моделированию // Вестник ЮУрГУ, серия «Математическое моделирование и программирование». 2012. Т. 12, №18 (277). С. 94–99

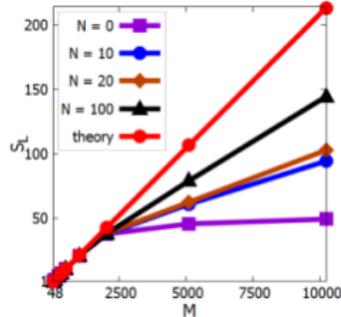
Постановка одного из экспериментов с имитационной моделью:

- за основу была взята архитектура кластера НКС-30Т ССКЦ.
- процессоры-вычислители делятся на $M_1 = 10, 20, 100$ групп.
- общее количество моделируемых процессоров $M = 1000, 10000, 100000, 500000$ при фиксированных значениях M_1 .

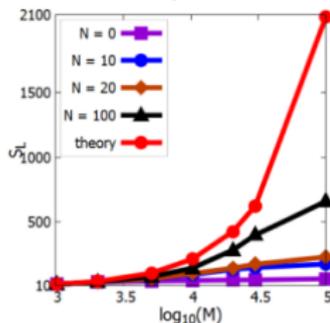
Глава 5



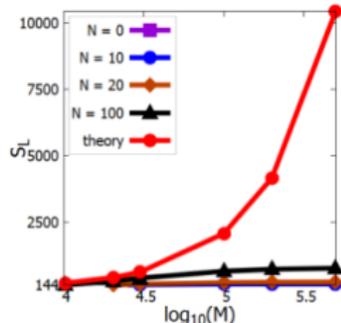
a)



b)



c)

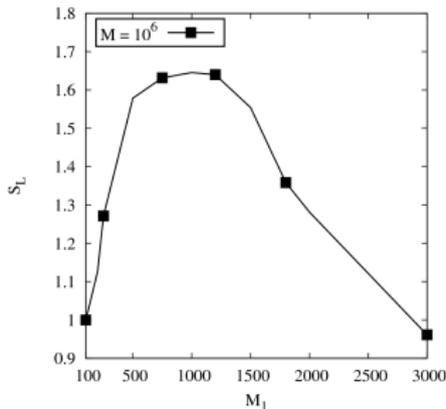


d)

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 5

Каково максимальное значение ускорения S_L при фиксированном количестве моделируемых процессоров $M = 10^6$ в зависимости от количества процессоров-сборщиков M_1 ?



Выводы:

- При $M_1 < 10^3$ дополнительные процессоры-сборщики перегружены обработкой данных, поступающих от процессоров-вычислителей;
- при $M_1 > 10^3$ перегружен центральный процессор-сборщик, занятый обработкой поступающих данных от процессоров-сборщиков.

Глава 6

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

Глава 6

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

Недостатки упомянутых разработок ПО:

- нет уверенности в применяемых параллельных генераторах псевдослучайных чисел;
- нет возможности реализации разных вариантов моделирования реализаций, например, моделирования одной реализации совместно на нескольких процессорах;
- предлагаемые подходы не нацелены на проведение численного параметрического анализа моделей;
- без согласования с авторами (и доработок под конкретную вычислительную систему) библиотеки не могут быть внедрены в практику серийных вычислений.

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

В библиотеке реализована разработанная в диссертация методика распределённого численного статистического моделирования и распределительный способ получения псевдослучайных чисел.

- 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 предназначена для работы на массивно-параллельных и гибридных вычислительных системах с использованием сопроцессоров Intel Xeon Phi.
- Библиотека 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 использовалась в ходе выполнения научно-исследовательских работ по государственному контракту от 19.08.2011 г. №07.514.11.4016.

С использованием библиотеки возможна быстрая переработка наработанных кодов прикладных программ численного статистического моделирования стандартным образом.

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

На основе единых принципов с использованием библиотеки PARMONC нами созданы параллельные программы:

- BOUNDARY-MC – для прецизионного расчёта вероятности недостижения границы области за заданное время;
- CONCENTRATION-MC – для прецизионного расчёта полной концентрации траекторий в точке за заданное время;
- COAGULATION-MC – для моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции;
- ELSHOW – для моделирования электронных лавин;
- AMIKS – для численного анализа стохастических осцилляторов.

В Обнинске в Физико-энергетический институте им. А.И. Лейпунского на основе использования библиотеки PARMONC создана библиотека программ для моделирования переноса излучения методом Монте-Карло [1, 2].

[1] Белоусов В. И. *Прецизионные методы Монте-Карло для расчета транспорта электронов: Кандидатская диссертация. 2012*

[2] Белоусов В. И. *Распараллеливание расчёта переноса электронов методом Монте-Карло при использовании комплекса BRAND и библиотеки программ PARMONC // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов. 2013. №1. С. 11–17.*

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.

В библиотеке реализованы функции и процедуры в том-же составе, с аналогичными названиями, набором аргументов и назначением, что и в библиотеке PARMONC.

Цели создания библиотеки:

- 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.

Глава 6

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.

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

Рекомендуется использовать разработанный в диссертации параллельный генератор псевдослучайных чисел.

Глава 6

Программа AMIKS

Программа AMIKS – удобный высокопроизводительный программный инструмент для численного анализа систем стохастических дифференциальных уравнений **большой размерности**, реализующих различные модели стохастических осцилляторов на высокопроизводительных вычислительных системах.

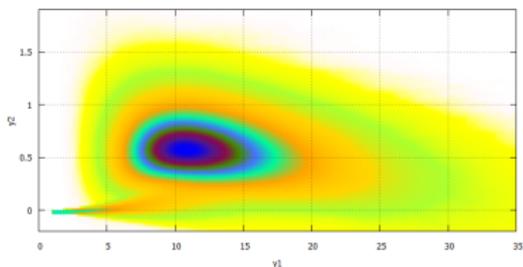
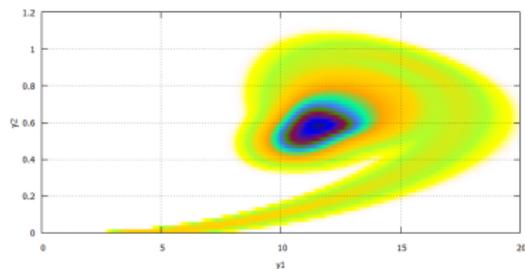
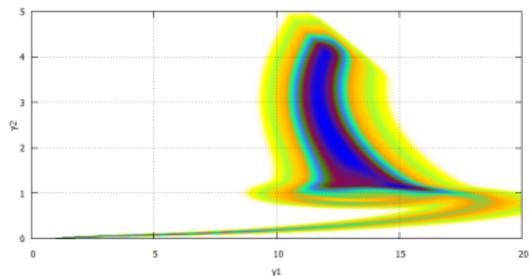
Базовым компонентом для распределения статистического моделирования является библиотека PARMONC.

Программа предназначена для численного анализа в следующих областях:

- линейные и нелинейные колебательные контуры,
- стохастические уравнения со случайной структурой,
- странные аттракторы,
- движение летательных космических аппаратов,
- поведение гироскопов,
- автоколебательные режимы в химических реакциях,
- движение заряженных частиц в электромагнитном поле,
- стохастические уравнения движения жидкости и газа.

Осенью 2016 г. в Издательстве СО РАН выходит наша монография «**Анализ стохастических колебаний методом Монте-Карло на суперкомпьютерах**».

Глава 6



Графики частотных фазовых портретов двух компонент СДУ для модели продольного движения стабилизированной по крену ракеты в зависимости от величины интенсивности внешних случайных шумов.

Заключение

В диссертации разработано новое научное направление – **параллельное статистическое моделирование кинетических процессов с использованием современных высокопроизводительных вычислительных систем.**

В этом направлении разработаны новые вероятностные модели кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц на основе использования многочастичных ансамблей и реализующие их экономичные методы численного статистического моделирования, а также методика распределённых вычислений на многопроцессорных вычислительных системах, в частности, обеспечивающая возможность проведения численного параметрического анализа вероятностных моделей.

Направления дальнейших исследований

- развитие методов расщепления и весового моделирования для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, при моделировании кинетических процессов;
- создание новых вероятностных моделей пространственно неоднородной коагуляции с учётом граничных условий, диффузии и химических реакций и реализующих их параллельных алгоритмов;
- создание новых вероятностных моделей формирования электронных лавин в газе с учётом собственного поля электронов и ионов, течения газа и химических реакций;
- улучшение статистических свойств генераторов базовых псевдослучайных чисел, создание методики загрузки максимального числа процессоров вычислительной системы.

БОЛЬШОЕ СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!