Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

О параллельном моделировании кинетических процессов методом Монте-Карло. Посвящается памяти Главного Теоретика Космонавтики академика М.В. Келдыша в год 60-летия запуска первого ИСЗ.

М.А. Марченко, Т.А. Сушкевич

イロト (理) (ヨト (ヨト) ヨー のへで

### Актуальность темы исследования

Применение **вероятностных моделей кинетических процессов** чрезвычайно актуально, поскольку они адекватно описывают процессы на микроскопическом уровне, позволяют учитывать влияние маловероятных событий. Реализация вероятностных моделей, как правило, связана с применением супервычислений. Важно, что вероятностные модели могут быть эффективно реализованы в виде параллельных алгоритмов и программ.

Разработаны новые модели, методы, алгоритмы и новый программный инструментарий – генераторы псевдослучайных чисел, система имитационного моделирования, библиотеки для расчета, визуализации и обработки результатов, реализованные на вычислительных системах с разными архитектурами для решения «больших» задач методом численного статистического моделирования в режиме распределенных вычислений.

Созданные модели, методы, алгоритмы и инструментарий – это **развиваемая** система знаний с функциональным наполнением, позволяющим уточнять и расширять не только возможности решения тех кинетических задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, на примере которых отрабатывалась сама концепция параллельных вычислений, но и существенно расширить сферу приложений в разных прикладных областях.

Созданный инструментарий позволяет обеспечить наследование, переносимость и адаптацию программного обеспечения к разным архитектурам вычислительных систем с минимальными потерями.

Численное статистическое моделирование при решении диффузионных задач с использованием распределённых вычислений При решении задач финансовой математики, функционирования телекоммуникационных систем, экологии, при оценке рисков экологических катастроф и др. применяются вероятностные диффузионные модели в постановках, связанных с оценкой функционалов, определяемых маловероятными событиями. Для решения этих трудоемких задач применяются супервычисления.



Рис.: a) оценка вероятности недостижения ценой финансового актива заданных границ за определенное время,  $\delta$ ) оценка полной концентрации опасных выбросов за определенное время.

Вероятностная модель, функционалы на траекториях Рассмотрим **вероятностную модель** *m*-мерного диффузионного процесса  $y(\cdot)$ , задаваемого автономной системой стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) в смысле Ито:

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

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

Введем условие поглощения и рассмотрим функционалы на траекториях:

$$\Phi(y(\cdot),T) = \mathbf{E} \left[ \int_{0}^{\min(T,\tau)} h(y(t)) dt + \psi(y(\tau)) \right], \ \tau - \text{момент поглощения } y(\cdot)$$

В практических важных постановках функционалы определяются достижением траекториями y(t) заданных областей с малой вероятностью, такие функционалы малы по абсолютной величине:  $|\Phi| \approx 0 ~(\sim 10^{-8} \div 10^{-6})$ . Ставится задача прецизионной оценки малых функционалов.

На сетке с шагом интегрирования  $\Delta t = T/n$  задается приближенная траектория  $\{y_i\}$  (i = 0, 1, 2, ..., n), рассчитанная по методу Эйлера.

Рассмотрим аналоговую оценку  $\zeta_D$  (оценку прямого моделирования), являющуюся функцией приближенной траектории  $\{y_i\}$ , такую что

$$\varphi = \mathrm{E}\zeta_D \approx \Phi$$
, причем  $|\Phi - \varphi| \leq C(\Delta t)^r$ ,  $r > 0$ 

## Оценка вероятности недостижения границы

### Прецизионная оценка вероятности недостижения границы

Ставится задача оценки вероятности недостижения границы области  $\Omega$  траекториями за заданное время от 0 до T. Аналоговая оценка:

$$\varphi(T, 0, y_0) = \mathbf{E}\zeta_D = \mathbf{E}\prod_{i=0}^n \chi_{\Omega}(y_i), \ y_0 \in \Omega.$$

Вычислительная проблема: величина трудоемкости аналоговой оценки имеет порядок величины

$$C(\zeta_D) \sim \exp(\rho T) \triangle t^{-1},$$

использование ее неэффективно при больших T и малых  $\Delta t$ .

### Метод расщепления (расщепленная оценка).

Рассмотрим точки расщепления  $0 \le T_1 < T_2 < \ldots < T_k \le T$ , вектор с натуральными компонентами  $\bar{n} = (n_1, n_2, \ldots, n_k)$  и определим **расщеплённую оценку**  $\zeta_S(k, \bar{n})$ : в точках  $T_i$  траектория расщепляется на  $n_i$  условно-независимых траекторий, дающих вклад в оценку с весом  $1/n_i$ .

Разработана процедура выбора параметров метода расщепления, близких к оптимальным по критерию величины трудоемкости.

Показано, что трудоёмкость расщеплённой оценки имеет порядок величины  $C(\zeta_S) \sim T^2.$ 

Расщепленная оценка эффективнее аналоговой при больших значениях  $T. \ \ \,$ 

### Оценка вероятности недостижения границы Весовая оценка с использованием приближения к функции ценности.

Весовая оценка  $\zeta_W$ вероятности недостижения границы имеет вид

$$\zeta_W = \prod_{i=0}^{n-1} \frac{k(y_i, y_{i+1})}{g_{t_i}(y_i \to y_{i+1})}, \ k(y_i, y_{i+1}) = r_E(y_i \to y_{i+1})\chi_\Omega(y_{i+1}),$$

где  $r_E(y_i \to y_{i+1})$  – переходная плотность, соответствующая методу Эйлера,  $g_{t_i}(y_i \to y_{i+1})$  – новая переходная плотность.

Плотность **«идеальной» весовой оценки** с нулевой дисперсией пропорциональна функции

$$k(y_i, y_{i+1}) \varphi(T, t_{i+1}, y_{i+1})$$

здесь  $\varphi(\cdot)$  является функцией ценности.

Показано, что если переходная плотность выбирается пропорциональной ф-ии

$$\begin{split} k(y,y_1) \ \varphi(T,t_1,y_1) \ (1+\varepsilon(t_1,y_1)), \end{split}$$
где |  $\varepsilon(t,y) \mid \leq c_1(\bigtriangleup t)^r$ равномерно по  $t,y, \ 0 < r \leq 1,$ то  $C(\zeta_W) \sim T^2 \varphi^{-2}. \end{split}$ 

### Весовая оценка эффективнее аналоговой при малых значениях $\Delta t$ .

В качестве **приближения к функции ценности**  $\varphi$  будем использовать функцию  $X_1(y_1) + c \Delta t$ , где  $X_1(y)$  – первая собственная функция эллиптического оператора, соответствующего уравнению Колмогорова для точной вероятности недостижения границ.

(\*ロト \*個ト \*ヨト \*ヨト = うへの

### Оценка вероятности недостижения границы

Разработанные алгоритмы реализованы в параллельной программе BOUNDARY-MC.

В расчетах на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН использовалась библиотека PARMONC, что обеспечило возможность проведения коррелированных расчетов с целью эффективного анализа трудоемкости методов в зависимости от параметров  $\Delta t$  и T при решении тестовых задач.

Относительная погрешность оценки функционалов – менее 1 %.

Результаты исследования трудоемкости алгоритмов приведены на рисунках:



Рис.: а) исследование при  $\Delta t \rightarrow 0$ : квадраты – трудоемкость аналоговой оценки, кружки – расщепленной, ромбы – весовой; б) исследование при увеличении T: трудоемкость расщепленной оценки.

◆□> <個> <目> <目> <目> <日> <000</p>

## Оценка полной концентрации траекторий

#### Прецизионная оценка полной концентрации траекторий в точке

Ставится задача оценки полной концентрации траекторий в точке  $y_c$  за заданное время от 0 до T. Аналоговая оценка («оценка по времени»):

$$\varphi = \mathbf{E}\zeta_D = \mathbf{E}\sum_{i=0}^n w(y_i) \Delta t, \qquad w(y) = \chi_{\Omega_c}(y)/V_c,$$

где  $\Omega_c$  – шар с центром в  $y_c$ ;  $V_c$  – его объем.

Вычислительная проблема: величина трудоемкости аналоговой оценки имеет порядок величины

$$C(\zeta_D) \sim \bigtriangleup t^{-1},$$

использование ее неэффективно при малых  $\Delta t$ .

Показано, что если **приближение к функции ценности**  $\varphi$  выбирается в виде

$$\varphi_a(z) = c_1(1 + \varepsilon(z))\varphi(z), \qquad |\varepsilon(z)| \le C = c_2(\Delta t)^r, \qquad 0.5 < r < 1,$$

то весовая оценка эффективнее аналоговой при малых значениях  $\triangle t$ .

В качестве **приближения к функции ценности**  $\varphi$  используется точная концентрация для 3-х мерной системы СДУ с постоянным вектором сноса A, постоянной матрицей диффузии B и нулевым начальным условием.

▲ロト ▲圖 ▶ ▲ 画 ▶ ▲ 画 ▼ の Q Q →

## Оценка полной концентрации траекторий

Разработана эффективная методика комбинирования прямого моделирования, методов расщепления и весового моделирования по ценности.

Рассматриваются вложенные шары  $\Omega_s \supset \Omega_w \supset \Omega_c$ с центром в точке  $y_c$ 



- из источника y<sub>0</sub> начинается прямое моделирование траектории;
- при попадании траектории в шар  $\Omega_s$  в точке пересечения границы  $z_s = (t_s, y_s)$  строятся *s* условно-независимых оценок  $\zeta^{(i)}(z_s)$   $(i = 1, \ldots, s)$  и для каждой из них производится прямое моделирование траектории;
- при попадании каждой траектории в шар  $\Omega_w$  переход на весовое моделирование, а при выходе из  $\Omega_w$  переход на прямое моделирование.

◆□> <個> < E> < E> < E < のへの</p>

## Оценка полной концентрации траекторий

Разработанный алгоритм реализован в параллельной программе CONCENTRATION-MC.

В расчетах на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН использовалась библиотека **PARMONC**, что обеспечило возможность проведения коррелированных расчетов с целью эффективного анализа трудоемкости методов.

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

Относительная погрешность оценки функционалов – менее 1%.

Результаты исследования трудоемкости алгоритма приведены в таблицах:

1) аналоговая оценка  $\zeta_D$ 

СДУ	$E\zeta_D \pm \sqrt{D\zeta_D/L}$	$D\zeta_D$	$t(\zeta_D)$	$C(\zeta_D)$
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)	$3.3 \cdot 10^{-5} \pm 9.42 \cdot 10^{-7}$	$8.2 \cdot 10^{-5}$	$5.48 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-7}$

### 2) комбинированная оценка $\zeta_{SW}$

СДУ	$E\zeta_{SW} \pm \sqrt{D\zeta_{SW}/L}$	$D\zeta_{SW}$	$t(\zeta_{SW})$	$C(\zeta_{SW})$
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)	$2.97 \cdot 10^{-5} \pm 2.4 \cdot 10^{-7}$	$5.5 \cdot 10^{-7}$	$1.19 \cdot 10^{-2}$	$6.55 \cdot 10^{-9}$

・ロト ・ 日 ・ ・ 日 ・ ・ 日 ・ ・ 日 ・

## Численное статистическое моделирование процесса пространственно неоднородной коагуляции с использованием распределённых вычислений

Задачи численного моделирования процессов коагуляции в дисперсных системах с учетом пространственной неоднородности возникают при исследовании образования наноразмерных частиц (порошков) при пламенном синтезе, образовании атмосферных аэрозолей и в других приложениях. Для решения этих трудоемких задач применяются супервычисления.



Рис.: лабораторная горелка; схема процесса пламенного синтеза наночастиц; микрофотографии агрегатов диоксида кремния.

◆□▶ ◆□▶ ◆三▶ ◆三▶ 三三 のへで

### Уравнение коагуляции, вероятностная модель

В пространственно-временной области  $\Omega \times (0, T]$ ,  $\Omega \subset R^3$  рассмотрим задачу Коши для системы нелинейных уравнений, описывающих процесс пространственно неоднородной коагуляции (**уравнение коагуляции**):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial t} + \operatorname{div}(v_1 c_1) &= -c_1 \sum_{j=1}^{\infty} K(x, 1, j) c_j, \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} + \operatorname{div}(v_i c_i) &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K(x, i-j, j) c_{i-j} c_j - c_i \sum_{j=1}^{\infty} K(x, i, j) c_j, \quad i \ge 2, \\ c_i(0, x) &= c_i^0(x), \ i = 1, 2, \dots. \end{aligned}$$

Здесь  $c_i = c_i(t,x)$  (i = 1, 2, ...) – концентрация *i*-меров в момент времени *t* в точке x;  $v_i(x)$  – заданное поле скоростей; K(x, i, j) – заданное ядро коагуляции.

Вероятностная модель процесса пространственно-неоднородной коагуляции основана на вероятностной интерпретации уравнения коагуляции.

Моделируется эволюция ансамблей  $\xi$  из N = N(t) тестовых частиц p = (l, x)(l – размер, x – координата) с целью оценки функционалов от решения:

$$\varphi_i(T) = \int_G c_i(T, x) dx \approx L^{-1} \sum_{k=1}^L \zeta_i^{(k)}, \quad \zeta_i^{(k)} = N_0^{-1} n_{\xi}(T, i, G)$$

Здесь  $N_0 = N(0), n_{\xi}(T, i, G)$  – число частиц при t = T, для которых  $l = i, x \in G$ .

### Пространственная регуляризация ядра коагуляции

С целью замены взаимодействия частиц в точке производится пространственная регуляризация ядра коагуляции; это делается двумя способами (Иванов, Рогазинский, 1989):

 область Ω разбивается на малые «ячейки» Ω<sub>1</sub>,...,Ω<sub>S</sub>, записывается регуляризованное ядро коагуляции:

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

где $\rho_s$ – объём $\Omega_s,\,x_s^*$ – некоторая точка из $\Omega_s,\,p_i=(l_i,x_i)~(i=1,2);$ 

2. считается, что взаимодействие пары частиц происходит при их попадании внутрь шара заданного радиуса r,тогда

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

 $h(x_1,x_2)=(4/3\ \pi r^3)^{-1}$ при  $|x_1-x_2|< r,\ h(x_1,x_2)=0$ при  $|x_1-x_2|\ge r,\ x_s^*$ – центр шара,  $p_i=(l_i,x_i)\ (i=1,2).$ 

Допустим, что для ядра коагуляции существует мажоранта

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

записывается соответствующая мажоранта  $\widehat{K}^{\rho}$  для регуляризованного ядра.

Для рассмотренного уравнения коагуляции такая регуляризация предлагается впервые.

・ロト ・昼 ・ ・ ヨ ・ ・ ヨ ・ うへの

# Метод мажорантной частоты

При моделировании реализации на интервале [0,T] в подынтервалах  $\Delta t$  производится расщепление по физическим процессам коагуляции и переноса частиц.

**Метод мажорантной частоты** (*Иванов, Рогазинский, 1988*) обеспечивает линейную зависимость времени счёта от числа тестовых частиц:

 время т между двумя коагуляционными актами распределено по экспоненциальному закону с параметром

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

 при реальном акте выбранная пара (p<sub>i</sub>, p<sub>j</sub>) образует одну новую частицу и состояние ансамбля изменяется следующим образом:

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

• в конце шага  $\Delta t$  новые координаты для всех частиц p = (l, x) вычисляются по формуле:  $x' = x + v_l(x) \Delta t$ .

Записано интегральное уравнение Фредгольма второго рода для плотности актов коагуляции, вероятностная интерпретация которого соответствует методу мажорантной частоты. Уравнение используется при обосновании соответствия численного решения решению уравнения коагуляции, а также при выводе соотношения для дисперсии статистических оценок функционалов  $\varphi_i$ .

Для рассмотренного уравнения коагуляции такой алгоритм метода мажорантной частоты предлагается впервые.

◆□▶ ◆□▶ ◆豆▶ ◆豆≯ 三豆 - のへで

## Параллельная модификация метода

Вычислительная проблема: в практических задачах число частиц N(t) в ансамбле настолько велико ( $10^7 \sim 10^9$ ), что выборочные значения ансамбля частиц  $\xi$  не помещаются в памяти одного процессора.

Выход – моделирование отдельных реализаций ансамбля частиц совместно на M процессорах (M > 1). Для этого область  $\Omega$  разделяется на M непересекающихся **процессорных областей**  $\widehat{\Omega}_1, \widehat{\Omega}_2, \dots, \widehat{\Omega}_M$  с сортировкой по ним частиц.

Параллельная модификация алгоритма метода мажорантной частоты:

- 1. начальное распределение частиц каждый процессор моделирует независимо от других процессоров;
- коагуляционные акты (реальные и фиктивные) на шаге △t каждым процессором моделируются независимо от других процессоров; на m-м процессоре время между коагуляционными актами экспоненциально распределено с параметром

$$\widehat{\nu}_m = 0.5(N_0\rho)^{-1}n_m(n_m-1)\widehat{K};$$

3. в конце каждого шага  $\Delta t$  вычисляются новые координаты для частиц и происходит обмен частицами между процессорами.

## Оценка ускорения от распараллеливания

При масштабировании параллельного алгоритма на многопроцессорную вычислительную систему будем придерживаться следующей стратегии: с увеличением числа процессоров остальные параметры алгоритма меняются так, что погрешность вычислений уменьшается.

Параметры параллельного алгоритма:

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

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

Относительным ускорением от распараллеливания назовём функцию:

$$\Phi = \frac{C(\zeta)|_{M=1}}{C(\zeta)|_{M>1}} \approx \frac{t_1|_{M=1}}{t_1|_{M>1}}, \quad C(\zeta) = t_1 \mathrm{D}\zeta \varepsilon_{det}^{-2}.$$

При моделировании значения параметров  $\overline{p}, N_0, \bigtriangleup t, \rho$ одинаковы для случаевM=1 и M>1.

Производится теоретический анализ величины среднего времени моделирования одной реализации ансамбля

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

где

- $t^{(i)}$  затраты на моделирование начального распределения частиц
- $t^{(c)}$  затраты на моделирование коагуляционных актов процессорами
- $t^{(e)}$  затраты на обмен данными между процессорами.

◆□▶ ◆昼▶ ◆臣▶ ◆臣▶ 臣 めへの

### Оценка ускорения от распараллеливания

Рассмотрим нелинейную зависимость начального числа тестовых частиц  $N_0$  от числа процессоров M:

$$N_0 \sim M^d, \ 0 \le d \le 1.$$

Асимптотическая связь между параметрами:

$$\Delta t \sim N_0^{-1}, \ \rho \sim N_0^{-1} \ \Rightarrow \ \mathrm{D}\zeta_i \sim N_0^{-1}, \ \varepsilon_{det} \sim N_0^{-1}, \ L \sim \varepsilon_{det}^{-2} \mathrm{D}\zeta_i \sim N_0.$$

Оценки величи<br/>н $\mathrm{E}t^{(i)},\mathrm{E}t^{(c)},\mathrm{E}t^{(e)}\colon$ 

$$\mathbf{E}t^{(i)} \approx C_i N_0, \qquad \mathbf{E}t^{(c)} \sim \frac{N_0}{M} \left(\frac{C_f}{M\rho} + C_r\right), \qquad \mathbf{E}t^{(e)} \sim C_e N_0 M^r.$$

Принципиально соотношение между параметром d, определяющим число частиц в зависимости от числа процессоров и параметром r, определяющим затраты на обмен данными между процессорами.

**Теоретические выводы:** величина относительного ускорения  $\Phi$  удовлетворяет следующим асимптотическим соотношениям при  $M \to \infty$ :

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

Приведенные соотношения полезны при оценке масштабируемости параллельного алгоритма; при выборе его параметров для конкретной вычислительной системы.

◆□▶ ◆課▶ ◆臣▶ ◆臣▶ 三臣 - のへで

Разработанный параллельный алгоритм реализован в программе COAGULATION-MC.

В расчетах на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН применялась библиотека РАRMONC, что обеспечило возможность проведения коррелированных расчетов с целью эффективного анализа ускорения от распараллеливания при изменении параметров  $N_0, \Delta t, \rho, M$  и процессорных областей  $\{\widehat{\Omega}_m\}_{m=1}^M$ .

Решалась модельная задача для уравнения коагуляции:

- область Ω является цилиндром, ось которого параллельна оси ОХ;
- ядро коагуляции  $K(i, j, \bar{x}) \equiv 1$  для всех  $\bar{x} \in \Omega$ ;
- поле скоростей направлено вдоль оси ОХ и не зависит от i:  $\bar{v}_i(\bar{x})\equiv (v_x(\bar{x}),0,0);$
- начальная концентрация частиц  $c_1^{(0)}(\bar{x}) = 1$  для всех  $\bar{x} \in \Omega$ ,  $c_i^{(0)}(\bar{x}) \equiv 0$  (i = 2, ...,) для всех  $\bar{x} \in \Omega$ ;
- граничные значения на основаниях цилиндра являются периодическими:  $c_i(t, \bar{x}_1) = c_i(t, \bar{x}_2) \ (i = 1, 2, ...), \ \bar{x}_1 = (0, y, z), \ \bar{x}_2 = (L, y, z).$

Для такой задачи известны точные значения функционалов, что позволяет контролировать детерминированную погрешность их оценок.

### Оценка ускорения от распараллеливания

В специальных расчетах показано, что в оценке  ${\rm E}t^{(e)} \sim C_e N_0 M^r$ значение  $r\approx 0.22.$ Для разных значений параметра d в формуле  $N_0\sim M^d$  проводились расчеты на 12, 24, 36, 48, 60 и 72 процессорах.

Величина  $N_0$  изменялась в пределах  $10^6 \sim 10^8$ .

Цилиндр делился на процессорные области (слои) одинаковой толщины перпендикулярно оси ОХ.

Относительная погрешность оценки функционалов – менее 10 %.

Результаты верификации теоретических выводов о поведении относительного ускорения при увеличении числа процессоров:



Рис.: зависимость величины относительного ускорения  $\Phi$  от числа процессоров M: а) d = 0.7, б) d = 1.0, в) d = 0.1 (сплошная линия – теоретическая оценка, ромбики - результаты расчетов)

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

Задачи численного моделирования переноса заряженных частиц в газе, а именно, процесса ионизационного размножения электронов или образования электронных лавин, возникают при изучении искровых разрядов, лавинных пробоев и др. явлений. Для решения этих трудоемких задач применяются супервычисления.





Рис.: фото искровых разрядов.

### Вероятностная модель электронной лавины

Для моделирования **процесса развития электронной лавины** рассматривается шестимерное пространство координат и скоростей. Параметры задачи:

- пространство между катодом и анодом (расстояние между ними d) заполнено азотом с концентрацией N и давлением p;
- напряженность электрического поля постоянно:  $\mathbf{E} = (0, 0, -E_z);$
- задаются сечения упругого рассеяния, возбуждения и ионизации для 24 типов взаимодействий электронов с молекулами газа.



Рис.: схема задачи (сечение в плоскости осей ОХ и ОZ).

Ставится задача моделирования **начальной стадия развития пробоя**, когда собственное электрическое поле электронов и ионов мало по сравнению с внешним.

Вероятностная модель процесса развития электронных лавин в газе основана на уравнении переноса с учетом размножения частиц. При этом моделируются реализации лавины – траектории ветвящегося процесса (дерева частиц).

## Функционалы

В заданные моменты времени  $t_i$  требуется оценить следующие функционалы:

- число частиц в лавине  $n(t_i)$ ;
- положение центра масс лавины  $r_c(t_i) = (< x >, < y >, < z >),$ где

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

• скорость центра масс лавины  $V_c(t_i) = \langle z \rangle / t_i;$ 

- средняя скорость частиц  $\langle V_z \rangle = \sum_{k=1}^n V_{z,k}(t_i)/n(t_i);$
- средняя кинетическая энергия частиц  $< T > = \sum_{k=1}^n T_k(t_i)/n(t_i);$
- полигон частот плотности частиц;
- коэффициенты продольной D<sub>L</sub> и поперечной диффузии D<sub>T</sub>;
- частота ионизации *v*<sub>ion</sub> (зависимости числа частиц в лавине от времени);
- коэффициента ударной ионизации *a<sub>ion</sub>* (выражает зависимость числа частиц в лавине от пройденного ею расстояния).

< □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □

## Моделирование дерева частиц

Особенности моделирования дерева частиц:

- с катода из точки  $\mathbf{r} = (0, 0, 0)$  в момент времени t = 0 происходит эмиссия  $n_0$  электронов с нулевыми энергиями;
- траектории движения каждого электрона прослеживаются до достижения времени t<sub>max</sub> или расстояния d; для того делаются шаги Δt по времени;
- в конце каждого шага Δt розыгрыш акта взаимодействия с вероятностью, определяемой полным микроскопическим сечением;
- розыгрыш типа взаимодействия производится в соответствии с заданными сечениями упругого рассеяния, возбуждения и ионизации;
- скорость частицы изменяется в соответствие с типом взаимодействия;
- при рождении вторичной частицы ее параметры определяются в соответствии с вероятностным распределением при заданных параметрах первичной частицы.

Для обработки дерева частиц используется лексикографическая схема.

Вычислительная проблема: число обрабатываемых частиц в дереве и машинное время на обработку растёт по экспоненциальному закону с ростом  $t_{max}$ :

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

# Методы распараллеливания

1) Крупноблочное распараллеливание: моделирование независимых реализаций распределяется по вычислительным ядрам на массивно-параллельной системе. Псевдослучайные числа распределяются по ядрам.

2) При наличии сопроцессоров в гибридной системе можно выделять вложенные параллельные блоки в алгоритме. Мелкоблочное распараллеливание: при накоплении на основном ядре достаточного числа частиц моделирование происходящих от них независимых поддеревьев распределяется по ядрам сопроцессора; для каждого поддерева учитывается его вклад в оценку функционала. Псевдослучайные числа распределяются по ядрам основного процессора и сопроцессора.



# Методы распараллеливания

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

Ускорение при комбинированном распараллеливании:

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

где  $M_1$  – число ядер основных процессоров (СРU), на которых производится крупноблочное распараллеливание,  $M_2$  – число ядер основных процессоров, к которому «прикреплено» по N ядер сопроцессора,  $\alpha$  – отношение производительности ядра сопроцессора и основного процессора.

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

Использовались программа ELSHOW и библиотека PARMONC.

При комбинированном распараллеливании по сравнению с крупноблочным распараллеливанием выигрыш во времени счета – в 4.4 раза:

$t_{max}$	$4 \cdot 10^{-11}$ 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 c.
$t_1^{(comb)}$	8.3 c.	1291.3 с.

◆□▶ ◆□▶ ◆三▶ ◆三▶ 三三 のへで

## Валидация модели

Разработанный алгоритм реализован в параллельной программе ELSHOW.

Проведена валидация вероятностной модели: в расчетах на кластере на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН использовалась библиотека РАRMONC, что обеспечило возможность проведения коррелированных расчетов для различных значений параметров  $\Delta t, t_{max}, E_z/p$ .

Относительная погрешность оценки функционалов – менее 2.6 %.

Сравнение расчетных данных с известными результатами:



Рис.: а) зависимость скорости дрейфа от  $E_z/p$ ; сплошная кривая –  $\langle V_z \rangle$ ; пунктир –  $V_c$ ; ромбики – экспериментальные данные; б) зависимость приведенного коэффициента ударной ионизации от  $E_z/p$ ; пунктирная линия и сплошная широкая линия – расчет с разными параметрами; тонкая линия – расчет с помощью программы BOLSIG+; ромбики – экспериментальные данные.

▲□▶ ▲□▶ ▲目▶ ▲目▶ 目 のへで

## Валидация модели

При численном статистическом моделировании лавины показано, что увеличение величины напряжения приводит к образованию наблюдаемых в эксперименте «хвостов» высокоэнергетичных (убегающих) электронов (выделены прямоугольником).



Рис.: Сечение реализации электронной лавины в плоскости XZ: a) E/p=50 B / (см Торр), б) E/p=500 B / (см Торр)

< □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □

Распределительный способ получения псевдослучайных чисел и методика распределённого численного статистического моделирования

С учетом современного уровня развития вычислительной техники весьма актуально создание методов **параллельной генерации псевдослучайных чисел**, пригодных для суперкомпьютерной реализации и осуществления параметрического анализа вероятностных моделей.

При реализации методики распределенных вычислений важно применять параллельные генераторы псевдослучайных чисел такого рода.

Актуальна также разработка способов **оценки масштабируемости** параллельных алгоритмов численного статистического моделирования.

ション ふゆ マ キャット マックタン

# Распределительный способ

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

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

Распределительный способ получения псевдослучайных чисел: базовая последовательность вначале разделяется для вычислительных экспериментов, затем полученные подпоследовательности разделяются для процессоров (групп вычислительных ядер), затем для реализаций и для ее элементов.

В отличие от распределения псевдослучайных чисел в порядке обращения к генератору, распределительный способ обеспечивает малое изменение результатов моделирования при малом изменении параметров задачи, улучшая параметрический анализ результатов.

Для заданной длины подпоследовательностей  $\mu$  их начальные значения  $\alpha_{k\mu}$  для k-го блока получаются по формуле

$$u_{(k+1)\mu} \equiv u_{k\mu} A^{\mu} \pmod{2^{128}}, \quad \alpha_{(k+1)\mu} = u_{(k+1)\mu} 2^{-128}, \ k = 0, 1, \dots$$

При распределении псевдослучайных чисел выделяются **случаи использова**ния массивно-параллельных и гибридных вычислительных систем, для каждого из которых учитываются варианты:

イロト (得) (日) (日) (日) () ()

- моделирование отдельных реализаций независимо на разных процессорах;
- моделирование каждой реализации совместно на нескольких процессорах.

Создан программный комплекс параллельных генераторов PARGENER-MC.

1. Были реализованы тесты *n*-мерной равномерности для выборок, которые были получены объединением начальных чисел из заданных подпоследовательностей (выбирались различными способами).

Многомерные распределения проверялись на равномерность в *n*-мерном кубе  $(n = 1, 2, \ldots, 8)$  по критерию  $\chi^2$ . Показано, что во всех случаях полученные значения статистики  $\tilde{\chi}^2$  не являются значимыми и тестирование успешно.

2. Путем решения тестовых задач проверялась статистическая эквивалентность разработанного параллельного генератора и а) конгруэнтного генератора с параметрами  $r = 40, A = 5^{17}$ ; б) параллельного генератора МТ2203 из библиотеки Intel MKL.

Были успешно проверены гипотезы о равенстве математических ожиданий для случайных оценок ряда функционалов (в том числе таких, для которых известно точное значение), получаемых независимо с использованием разработанного параллельного генератора и упомянутых генераторов.

**3.** В расчетах на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН показано, что разработанный параллельный генератор сравним по затратам машинного времени с библиотечным генератором МТ2203 при решении задач.

# Методика распределенного численного статистического моделирования

Разработана методика распределенного численного статистического моделирования для современных вычислительных систем с различными архитектурами. При распределении моделирования реализаций по процессорамвычислителям результаты оценки функционалов осредняются на центральном процессоре-сборщике по формуле

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

где  $l_m$  – объём выборки на *m*-м процессоре-вычислителе,  $\bar{\zeta}^{(m)}$  – соответствующее выборочное среднее ( $m=0,1,\ldots,M-1$ ).

### Для реализации методики предлагается использовать разработанный распределительный способ получения псевдослучайных чисел.

Целесообразно в асинхронном режиме производить **периодический** сбор результатов с процессоров-вычислителей, а на центральном процессоре-сборщике результаты периодически осреднять и сохранять на диск с целью:

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

## Имитационная модель исполнения программ

Рассматриваются две схемы связей между процессорами:

- Схема 1 с одним центральным процессором-сборщиком (a);
- Схема 2 с дополнительными процессорами-сборщиками (б).



Вычислительная проблема состоит в выборе схемы, обеспечивающей наилучшее ускорение на используемой вычислительной системе, а при использовании Схемы 2 – в определении ее параметров.

Разработана имитационная модель исполнения программ распределенного статистического моделирования на суперкомпьютере на основе мультиагентного подхода с использованием системы AGNES (Подкорытов, 2012):

- в качестве атомарной единицы в модели вычислений выбран вычислительный узел (процессор) и исполняемая на нем программа;
- каждый агент эмулирует поведение вычислительного узла и соответствующей программы;
- вычисления представляются в виде набора примитивных операций и временных характеристик каждой операции.

Исходные данные для калибровки модели получаются с использованием библиотеки PARMONC при решении конкретных задач на кластере НКС-30Т ССКЦ.

### Имитационная модель исполнения программ

Для исследования масштабируемости программы оценивается ускорение от распараллеливания  $S_L(M) = T_L(1)/T_L(M)$  при заданных  $L, M, M_1$ .

Параметры модели:

- общее число моделируемых процессоров  $M = 10^3, 10^4, 10^5, 5 \cdot 10^5;$
- число дополнительных процессоров-сборщиков  $M_1 = 10, 20, 100.$

Результаты имитационного моделирования:

• для Схемы 2 для  $M \sim 10^4 \div 10^6$  при увеличении числа дополнительных процессоров-сборщиков  $M_1$  зависимость  $S_L$  от M становится ближе к «идеальной», в то время как Схема 1 практически неэффективна;

• максимальное значение  $S_L$  достигается при  $M_1 \approx 10^3$ .

Результаты моделирования на рисунках:



Рис.: Зависимость ускорения  $S_L$  от M при разном числе дополнительных процессоров-сборщиков  $M_1$  (случай  $M_1 = 0$  соответствует Схеме 1): a)  $M = 10^5$ , б)  $M = 5 \cdot 10^5$ ; в) зависимость ускорения  $S_L$  от  $M_1$ ;  $M_2 \to + 3$ ,  $A \to + + 3$ ,  $A \to + + 3$ ,

Библиотеки для реализации распределённого численного статистического моделирования на супер-ЭВМ

В настоящее время актуально создание собственных программных продуктов для реализации алгоритмов распределенного численного статистического моделирования. Это важно с целью обеспечения импортозамещения в области суперкомпьютерных технологий.

# Библиотека PARMONC

В библиотеке **PARMONC** (сокращение от «PARallel MONte Carlo») реализованы разработанные в диссертации распределительный способ получения псевдослучайных чисел и методика распределённого численного статистического моделирования.

Библиотека представляет собой простой в использовании программный инструмент для реализации распределённого статистического моделирования на суперкомпьютерах с массивно-параллельными и гибридными архитектурами.

Библиотека внедрена в Центре коллективного пользования «Сибирский суперкомпьютерный центр» СО РАН (ЦКП ССКЦ СО РАН).

Предложена стандартная методология создания программ распределенного численного статистического моделирования.

### С использованием библиотеки на основе единых принципов возможна быстрая переработка пакетов прикладных программ из последовательных в параллельные.

На основе единых принципов с использованием библиотеки создан пакет параллельные прикладных программ BOUNDARY-MC, COAGULATION-MC, CONCENTRATION-MC, ELSHOW и AMIKS.

# Параллельная программа AMIKS

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

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

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.

# СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

▲□▶ ▲□▶ ▲目▶ ▲目▶ 目 のへで