

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ МЕТОДА ПРОБНЫХ ЧАСТИЦ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ

В статье предложен параллельный алгоритм метода пробных частиц (МПЧ), который является разновидностью статистического метода Монте-Карло для решения задач динамики разреженного газа и молекулярной газовой динамики. Структура алгоритмов методов Монте-Карло представляет собой серию статистических испытаний, что позволяет с высокой эффективностью осуществить параллелизацию процесса моделирования и значительно сократить время счета. Возможности параллелизации процесса вычислений наиболее исследованы для метода прямого моделирования Монте-Карло (ПММК). В результате анализа отличительных особенностей последовательных алгоритмов указанных методов, по аналогии с алгоритмом параллельных статистических испытаний, ПММК выбран оптимальный путь параллелизации МПЧ. Показано, что специально организованный вычислительный процесс позволяет осуществить распараллеливание алгоритма МПЧ по крупным независимым подзадачам. Проведены предварительные тестовые расчеты для разработанного параллельного алгоритма МПЧ с использованием многоядерной ПЭВМ. Результаты расчетов газодинамических параметров, полученные для задачи внутреннего течения в сопле Лавалья с последующим расширением струи в окружающее пространство, сравнивались с результатами последовательного алгоритма МПЧ и параллельного алгоритма нестационарного метода ПММК для установившегося течения. В результате анализа временных затрат для разных условий численного моделирования установлено, что параллелизация алгоритма МПЧ дает возможность сокращения машинного времени соответственно количеству ядер (или процессоров), участвующих в расчетах. Для тестовой задачи приведена зависимость реального ускорения и эффективности параллельного алгоритма МПЧ от числа используемых ядер многоядерного компьютера. Выполнено сравнение расчетных значений ускорения и эффективности с данными, соответствующими закону Амдала, и результатами численного эксперимента на суперкомпьютере массивно-параллельной архитектуры SPP-1600. Показано, что предложенный параллельный алгоритм МПЧ характеризуется высокой степенью эффективности и ускорения, поскольку временные затраты на обменные процессы сведены к минимуму и все используемые ядра ПЭВМ задействованы равномерно.

У статті запропоновано паралельний алгоритм методу пробних часток (МПЧ), що є різновидом статистичного методу Монте-Карло для рішення задач динаміки розрідженого газу й молекулярної газовой динаміки. Структура алгоритмів методів Монте-Карло представляє собою серію повторних розрахунків (статистичних випробувань), що дозволяє з досить високою ефективністю здійснити паралелізацію процесу моделювання й значно скоротити час розрахунку. Можливості паралелізації процесу обчислень найбільш досліджені для методу прямого моделювання Монте-Карло (ПММК). У результаті аналізу відмінних рис послідовних алгоритмів зазначених методів, за аналогією з алгоритмом паралельних статистичних випробувань, ПММК обрано оптимальний шлях паралелізації МПЧ. Показано, що спеціально організований обчислювальний процес дозволяє здійснити розпаралелювання алгоритму МПЧ по великим незалежним підзадачам. Проведено попередні тестові розрахунки для розробленого паралельного алгоритму МПЧ із використанням багатоядерної ПЕОМ. Результати розрахунків газодинамічних параметрів, які отримані для задачі внутрішнього плинину в соплі Лавалія з наступним розширенням струменя в навколишній простір, порівнювалися з результатами послідовного алгоритму МПЧ і паралельного алгоритму нестационарного методу ПММК для сталого плинину. Внаслідок аналізу часових витрат для різних умов чисельного моделювання встановлено, що паралелізація алгоритму МПЧ дає можливість скорочення машинного часу відповідно до кількості ядер (або процесорів), що беруть участь у розрахунках. Для тестової задачі наведена залежність реального прискорення й ефективності паралельного алгоритму МПЧ від числа використовуваних ядер багатоядерного комп'ютера. Виконано порівняння розрахункових значень прискорення та ефективності з даними, що відповідають закону Амдала, та результатами чисельного експерименту на суперкомп'ютері массивно-паралельної архітектури SPP-1600. Показано, що запропонований паралельний алгоритм МПЧ характеризується високим ступенем ефективності й прискорення, оскільки часові витрати на обмінні процеси зведені до мінімуму й всі використовувані ядра ПЕОМ задіяні рівномірно.

The paper deals with the test particles method (TPM) as a version of the Monte-Carlo statistical method for different problems of the rarefied gas dynamics and molecular gas dynamics. The structure algorithms of the Monte-Carlo methods presenting a series of repeat calculations (statistical tests) allow parallelization of simulation with a high efficiency and a significant reduction of machine time. It is found that the possibilities of parallelization of calculations are best studied using the Monte-Carlo direct simulation method (MCSSM). The research objective is to develop a parallel calculated algorithm of the TPM. An optimal method of the TPM parallelization is chosen analyzing special features of sequential algorithms of the above methods and studying the MCSSM parallel algorithms. It is shown that special calculations allow off-parallelizing the TPM algorithm on large independent problems. The results of calculations of gas dynamical parameters for a problem of the Laval nozzle internal flow followed by the jet expansion in the environment are compared with the results of the TPM sequential algorithm and a parallel algorithm of the MCSSM non-steady method for a steady flow. The time expended for different conditions of a numerical simulation is analyzed. It is found that parallelization of the TPM

© Л.Л. Печерица, 2013

algorithm allows reduction of machine time correspondingly the number of cores (or processors) participating in calculations. The dependency of a real acceleration and the efficiency of the TPM parallel algorithm on the used cores of a multi-core computer is presented for a test problem. Calculated values of the acceleration and the efficiency are compared with data conforming to the Amdal law and the results of a numerical experiment with the SPP-1600 massive parallel architecture computer. It is shown that the TPM parallel proposed algorithm is characterized by a high degree of the efficiency and the acceleration because the time expended for exchanged processes is held to a minimum and all used cores of a personal computer are evenly operational.

Промежуточная область течений разреженного газа является до настоящего времени наименее исследованной. Строгое описание течений в таких областях может быть выполнено с привлечением уравнений Больцмана и Навье–Стокса, решение которых связано с определенными математическими трудностями. Развиваемый в данной работе метод Монте-Карло является одним из наиболее распространенных численных статистических методов в кинетической теории разреженных газов. Его применение в области малых значений чисел Кнудсена ($Kn_{\infty} < 0,01$) наталкивается на значительные трудности, связанные с непомерно быстрым ростом необходимой памяти и расчетного времени ЭВМ. Эта проблема является общей для всех разработанных численных методов решения кинетических уравнений. Выходом из сложившейся ситуации может быть только уменьшение счетного времени и используемых машинных ресурсов. Основным направлением повышения производительности численного моделирования течений разреженного газа является параллелизация алгоритмов и их адаптация к архитектуре современных массивно-параллельных компьютеров.

Рассматриваемый в данной работе метод пробных частиц (МПЧ) является развитием одной из разновидностей метода Монте-Карло в стационарной постановке – подхода В. И. Власова [1, 2]. При реализации МПЧ моделируемое физическое пространство разбивается на малые объемы с заданными границами, линейные размеры которых меньше местной длины свободного пробега молекул. Расчетные алгоритмы по реализации МПЧ сводятся к осреднению молекулярных признаков в соответствующих ячейках расчетного поля при большом времени слежения за их случайными блужданиями среди полевых молекул. Рассматриваемый метод был развит для свободномолекулярного течения и распространен на переходную область вплоть до сплошно-средней, где ячейки расчетной сетки должны быть достаточно малы и для обеспечения необходимой точности результатов требуется большое расчетное время. Поэтому возможность параллелизации процесса вычислений в МПЧ открывает дальнейшую перспективу его развития.

Другой известной разновидностью метода Монте-Карло является разработанный О. М. Белоцерковским и В. Е. Яницким [3, 4] подход реализации идей Г. Берда [5]. На его основе получены наиболее важные результаты решения сложных задач современной аэрогазодинамики. В методе прямого моделирования Монте-Карло (ПММК) реальное течение газа моделируется достаточно большим числом разыгрываемых молекул. Метод ПММК использует принцип расщепления непрерывного процесса движения и столкновений молекул в разреженном газе на два последовательных независимых этапа на каждом малом временном шаге, величина которого во всей области должна быть меньше среднего времени между столкновениями молекул. Моделирование воспроизводит некоторый нестационарный процесс. Стационарное решение, если оно существует, достигается в результате процесса установления. Достижение необходимой точности моделирования требует осреднения по большому числу

временных шагов, количество которых зависит от числа моделирующих молекул и параметров задачи.

Сравнительный анализ МПЧ и ПММК показывает определенную общность в их реализации. Алгоритмы этих методов можно разбить на три основных блока [6]:

- обработка начальных данных, вычисление необходимых констант, обнуление массивов, генерация расчетной сетки;
- проведение необходимого количества статистических испытаний, программно реализованных как тело цикла;
- осреднение накапливаемой информации и ее обработка.

Осреднение информации осуществляется по времени пребывания молекул в ячейках для МПЧ и по проведенной серии испытаний для ПММК. Основные же отличия указанных алгоритмов заключаются во внутреннем содержании второго блока:

- в МПЧ каждое испытание включает генерацию частиц на границах области и слежение за их передвижением в пределах расчетной области. При моделировании движения молекул оцениваются времена пролета текущей ячейки, возможного столкновения молекул и отражения от преграды. В качестве реализованного выбирается то из перечисленных событий, время которого минимально;

- в методе ПММК процесс моделирования осуществляется по временным шагам и разделен на два этапа: первый – моделирование движения частиц независимо друг от друга и их индексацию по расчетным ячейкам, второй – моделирование процессов, происходящих в ячейке (межмолекулярные столкновения и взаимодействие с границами физического пространства). Каждое испытание включает генерацию частиц на границах области, их передвижение, переиндексацию и розыгрыш столкновений.

Результаты последующих итераций (серий испытаний) обоих методов не коррелируют с результатами предыдущих. Независимость результатов расчетов обеспечивается за счет автоматического сдвига генератора случайных чисел для каждого из проводимых испытаний.

При моделировании методами Монте-Карло время вычислений пропорционально числу испытаний N , в то время как их сходимость обратно пропорциональна \sqrt{N} . Это свойство последовательных алгоритмов методов статистического моделирования приводит к существенному увеличению объемов вычислений. В то же время структура таких алгоритмов, представляющая собой серию повторных расчетов, позволяет с весьма высокой эффективностью осуществить параллелизацию процесса моделирования с использованием многопроцессорных вычислительных систем.

Возможности параллелизации процесса вычислений наиболее всего исследованы на методе ПММК. Группой ученых Санкт-Петербургского Института высокопроизводительных вычислений и баз данных во главе с Г. А. Лукьяновым разработана общая методология высокопроизводительных вычислений с помощью ПММК на суперкомпьютерах различной архитектуры. На основе этой методологии решается задача выбора оптимального алгоритма и соответствующей ему архитектуры вычислительной системы [6 – 10]. Коллективом российских ученых Отдела моделирования сложных статистических систем Центра перспективных исследований Санкт-Петербургского государственного политехнического университета разработан комплекс параллельных алгоритмов и программ, обеспечивающих высокую эффектив-

ность ПММК на суперкомпьютерах различной архитектуры. В комплекс алгоритмов [11] входят: алгоритм параллельных статистически независимых испытаний (ПСНИ), алгоритм параллелизации по данным, алгоритм двухуровневой параллелизации со статической балансировкой и алгоритм двухуровневой параллелизации с динамической реаллокацией процессоров.

Алгоритм ПСНИ [8] характеризуется предельно высокой степенью параллелизма, ускорения и эффективности по сравнению с любым другим параллельным алгоритмом ПММК нестационарных течений и относится к типу параллелизации по независимым подзадачам. Независимость отдельных нестационарных реализаций ПММК позволяет выполнить их параллельно на разных процессорах. Применение ПСНИ на многопроцессорной системе приводит к сокращению числа итераций внешнего цикла последовательного алгоритма ПММК [6] для каждого отдельного процессора. Идея параллелизации ПСНИ заключается в разделении серии N независимых испытаний на n групп (процессов), которые реализуются параллельно на p процессорах. При $p = n$ достигается максимальное значение ускорения и эффективности данного алгоритма. После инициализации программы порождаются n параллельных процессов, каждый из которых получает свой уникальный в пределах задачи номер. Номер процесса определяет константу, на которую сдвигается генератор случайных чисел, а также номера частиц и ячеек, с которыми работает данный процесс. Для каждого процесса после выполнения блока подготовки данных выполняется блок моделирования движения и столкновений молекул. Общее число итераций для системы из p процессоров – N . Число итераций для каждого процесса $\approx N/n$. Обмен данными происходит только после завершения расчетов на всех процессорах. Обработка результатов ведется последовательно на одном процессоре.

Параллельное программирование с помощью МПЧ – совершенно новое направление в развитии идей В. И. Власова. Схема последовательного алгоритма МПЧ показана на рисунке 1. Анализ общности и отличий алгоритмов МПЧ и ПММК дают возможность попытки параллелизации МПЧ аналогично ПСНИ ПММК, но с учетом особенностей процесса блуждания пробных частиц на фоне полевых. Так как по сравнению с другими параллельными алгоритмами ПММК алгоритм ПСНИ обладает хорошими характеристиками производительности, то можно сделать положительный прогноз и в поведении соответствующих характеристик аналогичной параллелизации по независимым подзадачам для МПЧ.

По аналогии с алгоритмом ПСНИ ПММК, параллелизация МПЧ по независимым подзадачам заключается в разделении серии N испытаний на группы, каждая из которых реализуется параллельно на одном из p процессоров. При этом ключевым моментом МПЧ является процесс хаотического блуждания пробных частиц на фоне полевых. Основная трудность при моделировании хаотического движения молекул заключается в правильном расчете свободного пробега пробной молекулы и выборе ее скорости после столкновения с полевой молекулой. В отличие от ПММК, где отдельные реализации являются независимыми друг от друга, в МПЧ траектории движения молекул косвенно зависят от движения молекул на предшествующих испытаниях.

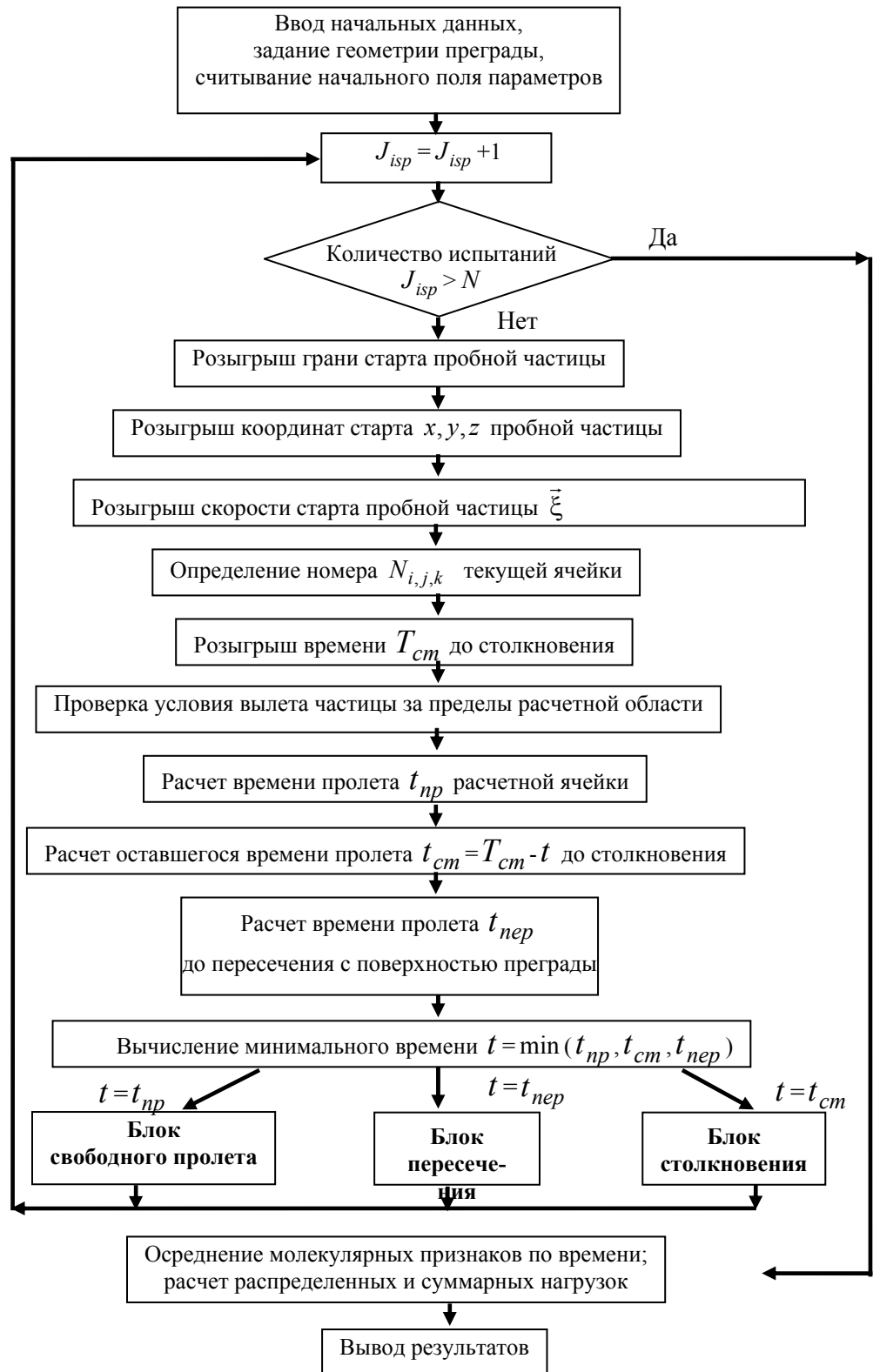


Рис. 1

При моделировании процесса блуждания в момент столкновения меняется не только скорость пробной молекулы в соответствующей пространственной ячейке, но и скорость полевой молекулы (скорость полевой молекулы после столкновения симметрична новой скорости пробной молекулы относительно плоскости, построенной на векторах скоростей пробной и полевой молекул до столкновения) [12]. Таким образом, в каждой группе испытаний, проводимых на одном из p процессоров, поле скоростей, на котором разыгрываются траектории движения пробных молекул, постоянно корректируется при каждом из столкновений. При таком моделировании движения молекул обеспечивается консервативность метода [13], частота столкновений пробной молекулы увеличивается вдвое, а суммарный импульс и энергия системы не меняются.

При параллелизации по независимым подзадачам на каждом из реальных процессоров выполняется блок моделирования процесса движения, столкновений молекул, их отражения от обтекаемой поверхности и взаимодействие с границами физического пространства. При использовании для параллелизации программного стандарта MPI с момента начала работы программы порождаются n параллельных процессов. При этом каждый процесс получает свой уникальный в пределах задачи номер, меняющийся от 0 до $n-1$. Выполнение блока подготовки данных (ввод начальных данных, задание геометрии преграды, считывание начального поля параметров и их обработка) выполняется в рамках нулевого процесса на 1-м процессоре. Сформированные рабочие массивы и константы передаются на остальные процессоры, на которых моделирование хаотического движения молекул осуществляется параллельно. После окончания моделирования все данные передаются на 1-й процессор, где и ведется обработка полученных результатов. Укрупненная схема алгоритма параллелизации по независимым подзадачам программы расчета МПЧ показана на рисунке 2.

Применение такого параллельного алгоритма приводит для каждого отдельного процессора к сокращению числа итераций внешнего цикла последовательного алгоритма МПЧ (рисунок 1). Число испытаний в блоке моделирования хаотического движения молекул для каждого процесса сокращается приблизительно в N/n раз. Инициированные n процессов перераспределяются по P процессорам. Область эффективного применения данного алгоритма достигается при $N \gg 1$ и $N \gg p$. Когда число инициированных процессов превышает количество реальных процессоров ($n > P$), определяется число необходимых виртуальных процессоров. Если $n < P$, то в вычислительном процессе задействованы не все реальные процессоры. В случае $n = P$ реализуемые процессы оптимальным образом используют все имеющиеся в наличии процессоры, равномерность загрузки которых зависит только от количества проводимых на них испытаний и траекторий молекул, разыгрываемых на каждом из испытаний.

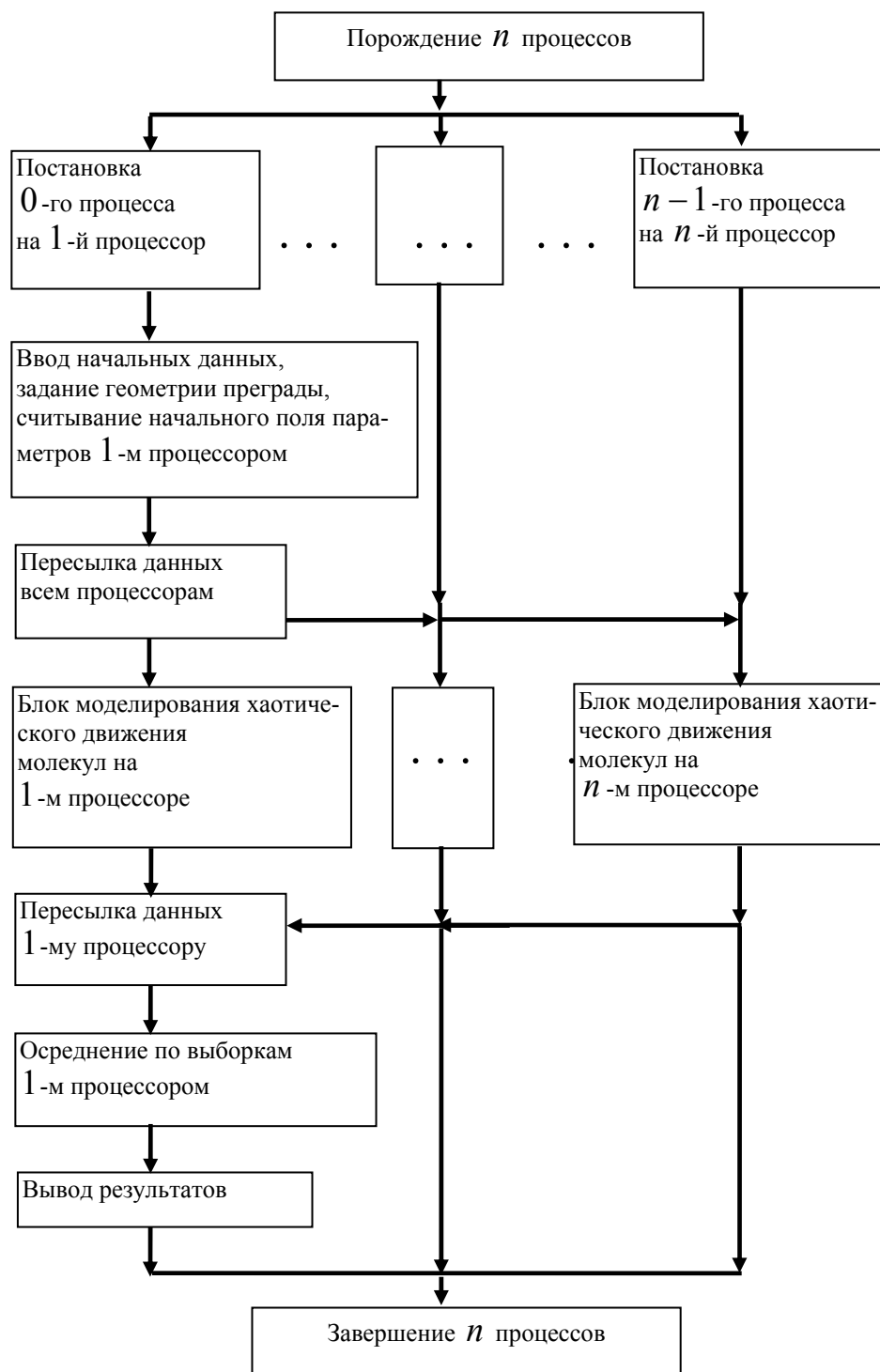


Рис. 2

Независимость расчетов в рассмотренном ранее алгоритме ПСНИ ПММК обеспечивается за счет того, что генератор случайных чисел на каждом испытании стартует с разных точек (сдвигается на константу, определяемую номером иницированного процесса). В отличие от ПСНИ, при параллелизации по независимым подзадачам МПЧ независимость результатов расчетов обеспечивается следующим образом. Для всех порожденных процессов начальные номера граней, координаты старта и исходные скорости пробных молекул одинаковы (генератор случайных чисел стартует с одной точки). В процессе движения молекул в моменты столкновений и отражений от преграды разыгрываются по два равновероятных направления скорости, выбор которых обеспечивает независимость расчетов на разных процессорах. Остановимся на этом более детально.

Вычисление скорости пробной молекулы после столкновения $\bar{\xi}'$ производится по формуле для столкновения упругих сфер [13], при этом два равновероятных направления $\bar{\xi}'$ симметричны относительно плоскости, в которой лежат скорости взаимодействующих пробной и полевой молекул:

$$\bar{\xi}' = \frac{1}{2}(\bar{\xi} + \bar{\xi}_{пол} \pm g\bar{e}), \quad (1)$$

где $\bar{\xi}$ – скорость пробной молекулы; $\bar{\xi}_{пол}$ – скорость полевой молекулы; g – модуль относительной скорости молекул перед столкновением; \bar{e} – случайный вектор, равномерно распределенный на единичной сфере. Компоненты вектора \bar{e} выражаются через углы φ , θ сферической системы координат и случайные числа R_{v+i} ($i=0,1\dots$):

$$\begin{aligned} e_x &= \cos \theta = 1 - 2R_v; \\ e_y &= \sin \theta \cdot \cos \varphi; \quad \varphi = 2\pi R_{v+1}; \\ e_z &= \sin \theta \cdot \sin \varphi. \end{aligned} \quad (2)$$

Скорость пробной молекулы при ее отражении от поверхности обтекаемого тела (преграды) соответствует диффузной схеме взаимодействия:

$$\xi'' = \sqrt{2RT_w} \cdot \sqrt{-\ln R_{v+2}R_{v+3}}, \quad (3)$$

где T_w – температура поверхности тела; R – газовая постоянная.

Равновероятные направления скорости отражения симметричны относительно внешней нормали к поверхности тела [13]:

$$\begin{aligned} \xi_x'' &= \xi'' \cdot \cos \theta; \quad \theta = 2\pi R_{v+4}; \\ \xi_y'' &= \xi'' \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi; \quad \sin \varphi = \pm \sqrt{R_{v+5}}; \\ \xi_z'' &= \xi'' \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi. \end{aligned} \quad (4)$$

Независимость расчетных результатов при параллелизации по независимым подзадачам МПЧ обеспечивается выбором разных сочетаний симметричных направлений указанных скоростей при 1-м, 2-м и т. д. столкновениях и отражениях. Выбор разных направлений скоростей обеспечивает различия в траекториях движения молекул для иницированных процессов. В зависимости от номера процесса после очередного столкновения (или отражения) мо-

лекул в формулах (1) и (4) выбираются знаки + или -. Начальные траектории первого испытания для всех процессов одинаковы. При первом столкновении (или отражении) траектории молекул четных и нечетных процессов уже отличаются друг от друга (1-й уровень разветвления по траекториям). При следующем событии траектории совпадают только на каждом 4-м процессе (2-й уровень). На k -том уровне траектории совпадают на процессах, номера которых кратны 2^k .

Алгоритм выбора направления скоростей в зависимости от номера процесса может быть различным. Один из возможных вариантов – введение многоуровневых признаков процессов:

- на 1-м уровне процессам присваиваются признаки 1 или 2 в соответствии с четностью их номеров. Процессам с четными признаками в формулах (1) и (4) ставится в соответствие знак +, нечетным признакам знак –;

- на 2-м уровне процессам с признаком 1 поочередно дописываются цифры 1 или 2, т. е. присваиваются новые признаки 11 или 12. Процессам с признаком 2 поочередно присваиваются новые признаки 21 или 22. В зависимости от четности новых признаков выбираются знаки + или –;

- на каждом последующем уровне ко всем предшествующим одинаковым признакам процессов, как и ранее, поочередно дописываются цифры 1 или 2. Четность вновь полученных признаков является определяющей в выборе знаков в формулах скоростей.

После того, как обеспечено отличие траекторий для всех инициированных процессов, дальнейший выбор знаков в формулах (1) и (4) осуществляется с вероятностью 0,5. Обычно расщепление по траекториям завершается уже на первых испытаниях. В связи с тем, что суммарное количество отражений и столкновений даже для небольшого числа испытаний достаточно велико, то ограничений на количество инициированных процессов практически нет, однако целесообразно, чтобы их количество не превышало количество реальных процессоров ($n \leq p$).

Для проведения тестирования параллельного алгоритма метода пробных молекул на многоядерном компьютере выбрана задача внутреннего течения в сопле Лавала с последующим расширением струи в окружающее пространство. Результаты численного моделирования данного течения с помощью последовательного алгоритма МПЧ приведены в [14], а результаты параллелизации ПММК по данным – в [7]. Условия течения соответствовали эксперименту, изложенному ранее в работе [15]. Расчет с помощью МПЧ проводился в рамках осесимметричной задачи на равномерной прямоугольной сетке. Геометрия расчетной области, включающей сопло истечения и прилегающую к его выходному сечению область расширения, условия и алгоритм расчета подробно описаны в работе [14]. Данная задача является идеальной для тестирования алгоритма МПЧ, поскольку размеры расчетной области позволяют при сравнительно небольшом количестве ячеек обеспечить в них хорошую статистику за счет переотражения молекул от стенок сопла. Линейный размер ячеек при этом не превосходит местную длину свободного пробега молекул для рассматриваемого режима истечения (число Кнудсена на срезе сопла $Kn_a \approx 9 \cdot 10^{-3}$).

На рисунках 3 и 4 приведено сравнение изолиний чисел Маха M и относительной плотности ρ/ρ_0 параллельного алгоритма МПЧ (нижняя плоскость) с соответствующими результатами ПММК [7] (верхняя полуплос-

кость). Изолинии строились в области с максимальными размерами 150 мм ($60 r_a$) и 100 мм ($40 r_a$).

Моделирование ПММК проводилось с помощью алгоритма параллелизации по данным на суперкомпьютере 8PP-1600. Эта вычислительная система содержит 8 процессоров, общий объем оперативной памяти 2 Гб, а пиковая производительность равна 1,6 GFLOPS (GFLOPS – 10^9 операций с плавающей запятой в секунду). Схема используемого в расчетах параллельного алгоритма ПММК подробно описана в [8], а детализация временных и сеточных параметров расчета ПММК – в [7].

При моделировании МПЧ [14] было проведено 4-е итерации. Шаг расчетной сетки по соответствующим осям составлял 0,15 мм и 0,2 мм. Число ячеек при таком разбиении расчетной области $\approx 8 \cdot 10^4$. Время счета 4-й итерации параллельного алгоритма МПЧ на 4-х ядерном однопроцессорном

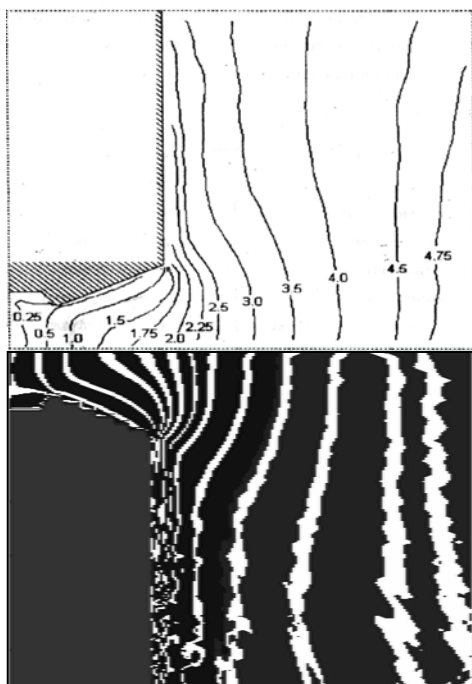


Рис. 3

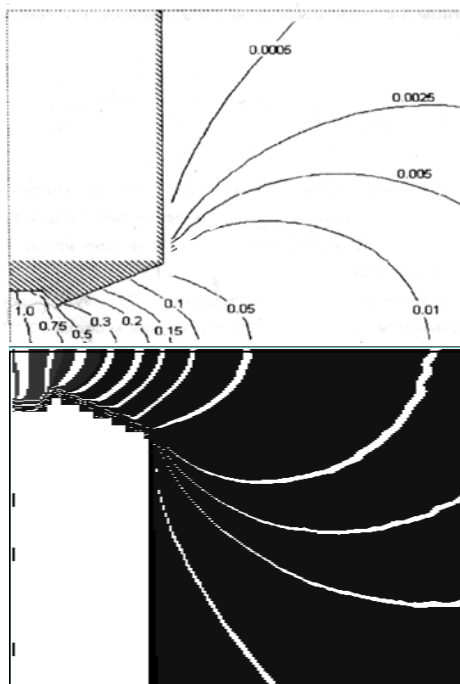


Рис. 4

компьютере Intel Core 2 (Quad Q8400 2,66 GHz с памятью DDR2 4 GBytes PC2-6400 (400 MHz) 2x2048 Mbytes ASUS P5KPL-AM) составило 628, 315, 210 и 158 секунд расчетного времени на 1-м, 2-х, 3-х и 4-х ядрах соответственно (для распределенных поровну между ядрами 10^6 испытаний). Программная поддержка стандарта MPI обеспечивалась с помощью компилятора Compaq Visual Fortran. При параллельных расчетах все процессы выполнялись параллельно, каждый – на своем реальном процессоре. Осреднение результатов, полученных всеми задействованными процессами, осуществлялось по их количеству. Машинное время при использовании параллельного алгоритма сокращается приблизительно во столько раз, сколько процессоров участвуют в расчетах.

Изолинии чисел Маха M и относительной плотности ρ/ρ_0 на рисунках 3 и 4 с точностью до статистических погрешностей совпадают с данными последовательного моделирования [14]. Время счета последовательного алго-

ритма на Intel Core 2 составило 2772 с \approx 46 минут. Поскольку в процессе счета последовательного алгоритма задействовано только одно ядро, на расчетное время влияют только быстродействие процессора и характеристики оперативного запоминающего устройства, а реальное количество ядер компьютера не имеет значения.

На рисунке 5 показана диаграмма, позволяющая сравнить времена счета параллельного алгоритма МПЧ с использованием стандарта MPI при решении задачи о стационарном истечении газа в вакуум на одноядерной персональной ПЭВМ Pentium-IV и 4-х ядерной ПЭВМ Intel Core 2. Приведенные на диаграмме времена счета соответствуют следующим расчетным вариантам:

1. параллельный алгоритм на ПЭВМ Pentium-IV;
2. имитация параллельного алгоритма для 4-х процессоров на Pentium-IV;
3. параллельный алгоритм на 1-м ядре ПЭВМ Intel Core 2;
4. параллельные расчеты на 2-х ядрах ПЭВМ Intel Core 2;
5. параллельные расчеты на 3-х ядрах ПЭВМ Intel Core 2;
6. параллельные расчеты на 4-х ядрах ПЭВМ Intel Core 2.

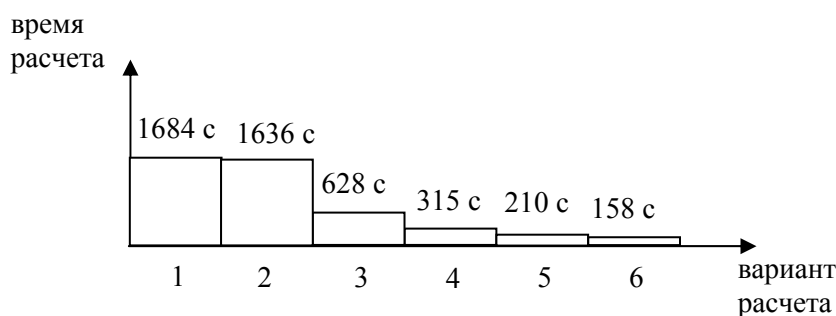


Рис. 5

Как показывает диаграмма, время счета зависит от характеристик ПЭВМ: переход от расчетов на Pentium-IV (Intel Pentium-IV 2400 MHz (BUS 533 MHz) 1024 MB (SDRAM PC-2100) к расчетам на Intel Core 2 сокращает временные затраты примерно в 2,7 – 2,9 раза (сравнение вариантов 1 и 3).

Из диаграммы видно, что время решения рассматриваемой задачи в случае использования параллельного алгоритма с разделением на n процессоров, распределенных по n реальным процессорам (варианты 4 – 6), примерно в n раз меньше, чем в случае реализации алгоритма на одном ядре (вариант 3). Получить идеальное ускорение, равное n , невозможно из-за затрат времени на обмен данными и т. д. Например, переход от расчетов на одном ядре (вариант 3) к расчетам на 4-х ядрах Intel Core 2 (вариант 6) сокращает время счета приблизительно в 4 раза. При имитации параллельного алгоритма для 4-х процессоров на Pentium-IV (один процессор реальный, три – виртуальные, смотри вариант 2) время счета практически не меняется по сравнению со временем счета параллельного алгоритма на одном процессоре (вариант 1).

Таким образом, при решении указанной задачи в результате перехода от одноядерной ПЭВМ Pentium-IV (вариант 1) к 4-х ядерной ПЭВМ Intel Core 2 (вариант 6) удалось добиться сокращения расчетного времени приблизительно в 10 раз.

Было проведено сравнение временных затрат, требующихся для реализации различных частей двух параллельных алгоритмов: МПЧ при расчете

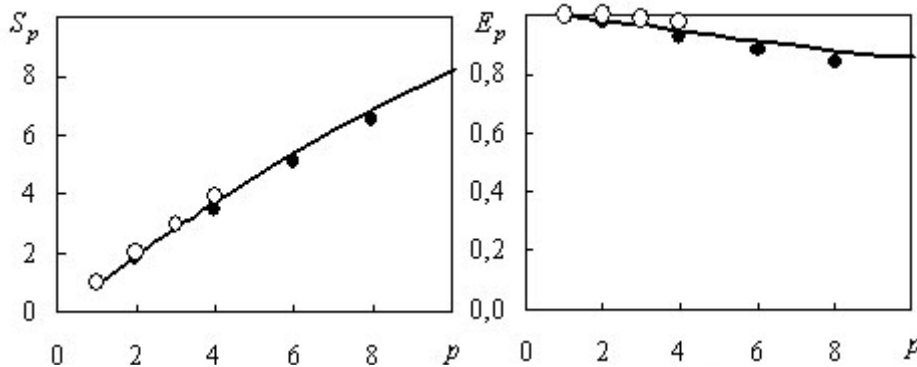


Рис. 6

Рис. 7

внутреннего течения в сопле Лавала на 4-х ядрах ПЭВМ Intel Core 2 ($T_p = 158$ с) и ПММК при расчете свободного истечения газа в вакуум на 8-ми процессорном кластере Parsytec CC/16 ($T_p = 652$ с) [6]. Выявлено, что в обоих случаях доля параллельных вычислений от общего объема составила $\alpha_a \approx 0,99$, а временные составляющие параллельного счета, обмена данными и сохранения информации малы и близки друг другу.

Для параллельного алгоритма МПЧ зависимость ускорения S_p ($S_p = T_1/T_p$, где T_1 – время работы параллельного алгоритма на одном процессоре; T_p – время работы параллельного алгоритма на p -процессорной вычислительной системе) от числа p используемых ядер ПЭВМ Intel Core 2 приведено на рисунке 6 (белые точки). Расчетные значения ускорения S_p хорошо согласуются с приведенными на этом же рисунке теоретическими кривыми, соответствующими закону Амдала, и данными параллельного алгоритма ПММК (черные точки), полученными на суперкомпьютере массивно-параллельной архитектуры SPP-1600 (8 процессоров) [10].

Эффективность параллельных вычислений $E_p = 1/((1 - \alpha_a)p + \alpha_a)$ и определяет среднюю долю времени реализации алгоритма, в течение которого ядра (или процессоры) реально используются для решения задачи. Так как $\alpha_a \approx 0,99$, то эффективность рассматриваемого параллельного алгоритма также близка к единице (при расчетах на 1, 2, 3, 4 - х ядрах $E_p \geq 0,97$, рисунок 7).

Рассмотренная тестовая задача позволяет сравнить времена счета при переходе от последовательного алгоритма МПЧ к параллельному. Анализ расчетных времен показал, что параллелизация дает возможность сокращения машинного времени приблизительно во столько раз, сколько ядер (процессоров или компьютеров) участвуют в расчетах. Получить идеальное ускорение невозможно из-за затрат времени на обмен данными и т. п. Предложенный параллельный алгоритм МПЧ построен таким образом, что временные затраты на обменные процессы сведены к минимуму, а все используемые ядра задействованы равномерно. Поэтому разработанный алгоритм характеризуется высокой степенью эффективности и ускорения, что подтверждают рисунки 6 и 7.

1. Власов В. И. Улучшение метода статистических испытаний (Монте-Карло) для расчета течений разреженных газов / В. И. Власов // Докл. АН СССР. – 1966. – Т. 167, № 5. – С. 1016 – 1018.

2. *Власов В. И.* Консервативный вариант метода пробных молекул (Монте-Карло) / *В. И. Власов* // Труды VIII Всесоюзной конф. по динамике разр. газов (Численные и аналитические методы в динамике разреженных газов). – М., 1986. – С. 81 – 85.
3. *Белоцерковский О. М.* Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа / *О. М. Белоцерковский, В. Е. Яницкий* // ЖВМиМФ. – 1975. – Т. 15. – С. 1195 – 1208.
4. *Белоцерковский О. М.* Прямое статистическое моделирование задач аэродинамики / *О. М. Белоцерковский, А. И. Ерофеев, В. Е. Яницкий*. – Вычислительный центр АН СССР. – 1983. – 55 с.
5. *Берд Г.* Молекулярная газовая динамика / *Г. Берд*. – М. : Мир, 1981. – 319 с.
6. *Быков Н. Ю.* Параллельное прямое моделирование Монте-Карло нестационарных течений разреженного газа на суперкомпьютерах массивно-параллельной архитектуры в молекулярной газовой динамике / *Н. Ю. Быков, Г. А. Лукьянов*. – С.-Петербург, 1997. – 33 с. (Препринт / Ин-т Высокопроизводительных Вычислений и Баз Данных ; № 5-97).
7. *Гришин И. А.* Параллелизация по данным прямого моделирования Монте-Карло в молекулярной газовой динамике / *И. А. Гришин, В. В. Захаров, Г. А. Лукьянов*. – С.-Петербург, 1998. – 32 с. (Препринт / Ин-т Высокопроизводительных Вычислений и Баз Данных ; № 03-98).
8. *Захаров В. В.* Параллельные алгоритмы прямого моделирования Монте-Карло в молекулярной газовой динамике : методическое пособие для пользователей / *В. В. Захаров, Г. А. Лукьянов, Г. О. Ханларов*. – С.-Петербург : Ин-т Высокопроизводительных Вычислений и Баз Данных, 1999. – 46 с.
9. Алгоритмы двухуровневой параллелизации ПМК для решения нестационарных задач молекулярной газовой динамики / *А. В. Богданов, Н. Ю. Быков, И. А. Гришин, В. В. Захаров, Г. А. Лукьянов, Гр. О. Ханларов* // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12, № 6. – С. 97 – 101.
10. *Захаров В. В.* Параллельное прямое моделирование Монте-Карло течений разреженного газа на многопроцессорных вычислительных системах различной архитектуры / *В. В. Захаров, Г. А. Лукьянов* // Тезисы докладов 3-й Всероссийской молодежной школы "Суперкомпьютерные вычислительно-информационные технологии в физических и химических исследованиях", Черногоровка, 2001. – С. 42 – 46.
11. Суперкомпьютерные технологии прямого моделирования Монте-Карло в молекулярной газовой динамике. – Режим доступа к документу : <http://www.spbcas.ru/mccc/parallel/parallel.htm>.
12. *Переухов В. А.* Применение метода Монте-Карло в динамике сильно разреженного газа / *В. А. Переухов* // Динамика разреженного газа и молекулярная газовая динамика. – М. : ЦАГИ, 1972. – Вып. 1411. – С. 54 – 72.
13. *Власов В. И.* Расчет обтекания пластины под углом атаки потоком разреженного газа / *В. И. Власов* // Ученые записки ЦАГИ. – 1973. – Т. IV, № 1. – С. 17 – 24.
14. *Басс В. П.* Численное моделирование стационарного истечения струи двигателя малой тяги в вакуум / *В. П. Басс, Л. Л. Печерица* // Техническая механика. – 2011. – № 4. – С. 82 – 87.
15. *Boyd I. D.* Particle simulations of helium microthruster flows / *I. D. Boyd, Y. R. Jafry, J. V. Dukul* // J. of Spacecraft and Rockets. – 1994. – Vol. 31, N 2. – P. 271 – 277.

Институт технической механики
НАН Украины и ГКА Украины,
г. Днепропетровск

Получено 20.12.12,
в окончательном варианте 26.02.13