УДК 681.3:06/519.245+533.7

Л. Л. ПЕЧЕРИЦА

ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПАРАЛЛЕЛИЗАЦИИ МЕТОДА ПРОБНЫХ ЧАСТИЦ ПО СТАТИСТИЧЕСКИ НЕЗАВИСИМЫМ ИСПЫТАНИЯМ

Рассматривается разновидность статистического метода Монте-Карло в стационарной постановке – метод пробных частиц (МПЧ). На предыдущих этапах работы было проведено распараллеливание последовательного алгоритма МПЧ по крупным независимым подзадачам (ПНП). Тестирование алгоритма ПНП на задаче внутреннего течения в сопле Лаваля с последующим расширением струи в окружающее пространство показало высокую степень эффективности и ускорения алгоритма. Однако тестирование, проведенное на задаче внешнего обтекания, выявило существенные недостатки ПНП. Выявлено, что разработанный алгоритм фактически нарушает некоторые принципы МПЧ, в результате чего поля скоростей в процессе итераций плохо устанавливаются. Возникла необходимость построения параллельного алгоритма, позволяющего ускорить процесс установления скоростных полей. Для этого был разработан алгоритм параллелизации по статистически независимым испытаниям (ПСНИ), позволяющий учитывать возмущения скоростей, возникающие в процессе моделирования траекторий пробных частиц на каждом из работающих ядер, в едином формируемом поле. ПСНИ сводится к проведению серии параллельных испытаний, реализуемых по одному на каждом ядре. После осуществления серии расчетов между ядрами проводится синхронизация данных – обмен накопленными изменениями в распределении скоростей полевых молекул. Последующие розыгрыши траекторий на всех ядрах проводятся на едином обновленном скоростном поле. После окончания всех испытаний полученные в расчетных ячейках суммарные характеристики передаются на одно из ядер, где осредняются моменты функции распределения по суммарному времени пребывания частиц в ячейках. С помощью алгоритма ПСНИ проведены тестовые расчеты на многоядерном процессоре и сделано сравнение полученных результатов с аналогичными данными последовательного алгоритма МПЧ, а также результатами расчетов на одном ядре. Установлено, что при использовании ПСНИ количество используемых ядер не влияет на качество получаемых результатов, а влияет только на расчетное время. В статье подробно проанализированы временные затраты для разных вариантов модернизации алгоритма ПСНИ, позволяющие минимизировать расчетное время за счет сокращения количества обменов между ядрами.

Розглядається різновид статистичного методу Монте-Карло в стаціонарній постановці – метод пробних часток (МПЧ). На попередніх етапах роботи було здійснено розпаралелювання послідовного алгоритму МПЧ по крупних незалежних підзадачах (ПНП). Тестування алгоритму ПНП на задачі внутрішньої течії в соплі Лаваля з наступним розширенням струменя в навколишній простір показало високий ступінь ефективності й прискорення алгоритму. Однак тестування, проведене на задачі зовнішнього обтікання, виявило недоліки ПНП. Виявлено, що розроблений алгоритм фактично порушує деякі принципи МПЧ, внаслідок чого поля швидкостей при ітераціях погано встановлюються. Виникла необхідність побудови паралельного алгоритму, що дає можливість прискорити процес установлення швидкісних полів. Для цього був розроблений алгоритм паралелізації по статистично незалежних випробуваннях (ПСНВ), що дозволяє враховувати збурення швидкостей, які виникають в процесі моделювання траєкторій пробних часток на кожному з працюючих ядер, в єдиному полі, що формується. ПСНВ полягає в проведенні серії паралельних випробувань, реалізованих паралельно по одному на кожному ядрі. Після здійснення кожної серії розрахунків між ядрами проводиться синхронізація даних – обмін накопиченими змінами в розподілі швидкостей польових молекул. Наступні розіграші траєкторій на всіх ядрах проводяться на єдиному поновленому полі швидкості. Після закінчення всіх випробувань отримані в розрахункових комірках сумарні характеристики передаються на одне з ядер, де осереднюються моменти функції розподілу за сумарним часом перебування часток в комірках. За допомогою алгоритму ПСНВ проведено тестові розрахунки на багатоядерному процесорі й зроблено порівняння отриманих результатів з аналогічними даними послідовного алгоритму МПЧ, а також результатами розрахунків на одному ядрі. Встановлено, що при використанні алгоритму ПСНВ кількість використовуваних ядер не впливає на якість одержуваних результатів, а впливає тільки на розрахунковий час. У статті докладно проаналізовано часові витрати для різних варіантів модернізації алгоритму ПСНВ, що дозволяє мінімізувати розрахунковий час за рахунок скорочення кількості обмінів між ядрами.

The test particles method (TPM) as a version of the Monte-Carlo statistic method for the stationary statement is considered. Nonparalleling a sequential algorithm of the TPM as large independent subproblems (LISs) has been performed at previous stages. Testing the LISs algorithm using the problem of an internal flow through Laval nozzle followed by the environmental spraying jet has demonstrated a high degree of the efficiency and the algorithm acceleration. However, testing with a problem of an internal flow past has revealed LISs significant disadvantages. It has been found that the algorithm developed has violated in fact some TPM principles resulting in poorly determined velocity fields in the course of iterations. A demand arose for construction of a parallel algorithm to accelerate the determination of velocity fields. Thus, the algorithm for paralleling on statistically independent tests (PSIT) has been developed to take into account velocity disturbances in simulating trajectories of test particles on each operational cores in a single formable field. PSIT reduces to a series of parallel tests conducted singly on each core. Following computations, the data are synchronized between cores, namely, an exchange of accumulated variations in velocity disturbances of field molecules. Subsequent drawing trajectories on all of the cores is conducted on a single renewed velocity field. After all of the tests the summary characteristics due to computational meshes are transferred to one of cores where moments of the disturbance function are averaged on the summing time of residence of particles into meshes. Using the PSIT algorithm, test computations are made using a multi-core processor. The results obtained are compared with the analogue data of the TPM sequential algorithm, as well as the one-core computational results. It is established that the number of cores used is not affected the results obtained and affected only the computational time when using the PSIT. The time for various versions of the PSIT updated algorithm to minimize the computational time due to reduction of the number of exchanges between cores is fully considered in the paper.

Ключевые слова: *метод Монте–Карло, метод пробных частиц, параллельные алгоритмы, многоядерный компьютер, расчетное время*.

Метод Монте–Карло широко используется для решения разнообразных задач кинетической теории газов. Сущность метода заключается в многократном численном моделировании некоторого случайного процесса. Значения искомых характеристик определяются путем статистической обработки полученных данных.

В газовой динамике существуют две разновидности метода Монте–Карло – нестационарное прямое моделирование Монте–Карло (ПММК) [1] и метод пробных частиц (МПЧ) в стационарной постановке. Метод МПЧ основан на подходе В. И. Власова [2, 3] и заключается в численном моделировании блужданий пробных молекул на фоне полевых путем проведения ряда последовательных итераций до достижения сходимости результатов. Пробные молекулы разыгрываются с контрольной поверхности, описанной вокруг обтекаемого тела, и имеют газодинамические характеристики, соответствующие набегающему потоку. Полевые молекулы полагаются неподвижными с параметрами, полученными при расчетах на предыдущей итерации. На начальной итерации розыгрыш траекторий пробных молекул проводится на невозмущенном или полученном предварительно свободномолекулярном поле.

Как и все статистические методы, ПММК и МПЧ основаны на проведении большого числа статистических испытаний и поэтому требуют выполнения огромной вычислительной работы. Поэтому одним из путей дальнейшего развития этих методов является их адаптация к вычислениям на многоядерных компьютерах и суперкомпьютерах параллельной архитектуры [4, 5]. Возможности параллелизации процесса вычислений наиболее исследованы в методе ПММК, для которого уже разработан ряд параллельных алгоритмов [6 – 11]. Организация последовательного алгоритма МПЧ и анализ существующих параллельных алгоритмов ПММК позволили осуществить распараллеливание МПЧ по крупным независимым подзадачам (ПНП) аналогично предложенному в [8] алгоритму для ПММК.

Алгоритм ПНП подробно описан в [12, 13]. На параллельно работающих ядрах (или процессорах) реализуются несколько независимых серий моделирования движения пробной молекулы с последующим осреднением полученных газодинамических характеристик по количеству ядер (или процессоров) [12]. Предложенный параллельный алгоритм ПНП МПЧ построен таким образом, что временные затраты на обменные процессы сведены к минимуму, а все используемые ядра задействованы равномерно.

Тестирование алгоритма ПНП проводилось на задаче внутреннего течения в сопле Лаваля с последующим расширением струи в окружающее пространство [14]. Благодаря полной загрузке всех участвующих в расчетах процессоров, рабочий алгоритм параллелизации МПЧ по независимым подзадачам позволил достигнуть высокой экономии машинного времени и характеризуется высокой степенью эффективности и ускорения.

Однако проведенное на задаче внешнего обтекания последующее тестирование ПНП МПЧ выявило его существенные недостатки [15]. В качестве тестовой была выбрана задача входа в плотные слои атмосферы Земли 2-й ступени ракеты-носителя (РН) «Циклон-4» под ненулевым углом атаки. Форма РН аппроксимировалась круговым цилиндром, имитирующим 2-ю ступень РН и имеющим длину $L = 23$ м и диаметр $D = 3$ м. Скорость движения РН $V_\infty \approx 7{,}8$ км/с, а температура поверхности $T_w = 300$ К (температурный фактор $t_w \approx 0{,}01$). В процессе численного моделирования набегающий поток задавался моноскоростным, состоящим из двухатомного газа, а параметры атмосферы в зависимости от высоты полета брались в соответствии с ГОСТ 4401–81 [16]. Подробно условия указанного численного эксперимента описаны в [17].

Выбор данной расчетной задачи обусловлен тем, что позволяет рассмотреть разные режимы обтекания: от свободномолекулярного (на больших высотах) до близкого к сплошносредному (при спуске до плотных слоев атмосферы). Кроме того, для рассматриваемой задачи ранее [17] были построены поля газодинамических параметров с использованием разработанного ранее последовательного алгоритма МПЧ в трехмерной постановке. Сравнение интегральных характеристик внешнего обтекания преграды, полученных при разных режимах обтекания с помощью последовательного алгоритма МПЧ, показывает их хорошее соответствие имеющимся для данной задачи значениям коэффициента лобового сопротивления, соответствующим теории локальности [18]. Как было установлено при расчетах последовательным алгоритмом МПЧ [17], качество полей параметров в окрестности ступени РН при выборке 10^6 является удовлетворительным, а для хорошей сходимости результатов при вычислении интегральных силовых характеристик достаточно значительно меньшего количества испытаний. Поэтому дальнейшие расчеты проводились для 10^6 испытаний.

В результате тестирования ПНП на задаче обтекания 2-й ступени ракеты-носителя под углом атаки 10^0 установлено, что разработанный алгоритм учитывает не все особенности МПЧ. Как следствие этого, количество задействованных в расчетах ядер (процессоров) при внешнем обтекании влияет на качество получаемых результатов. При расчетах на нескольких ядрах результаты существенно отличаются от данных, полученных при том же количестве испытаний на 1-м ядре. Рисунки 1 и 2 демонстрируют отличие полей безразмерной плотности ρ/ρ_∞ (ρ_∞ – плотность набегающего потока), полученных на 1-й итерации для высоты 90 км с помощью алгоритма ПНП на 1-м и 4-х ядрах.

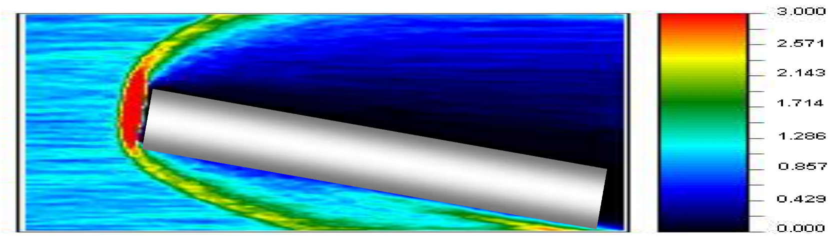

Рис. 1

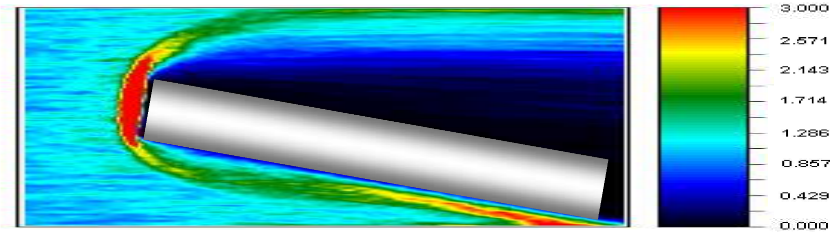

Рис. 2

Анализ причин такой ситуации показал возникающую при ПСНИ недостаточную статистику (т. е. недостаточное суммарное время) пребывания пробных молекул в расчетных ячейках на каждом из ядер, в результате чего поля скоростей на проводимых расчетных итерациях не устанавливаются. Поэтому единственным выходом является построение параллельного алгоритма, дающего возможность ускорить процесс установления полей скорости полевых молекул. Для этого необходимо учитывать возмущения, вносимые в распределение скоростных полей при всех испытаниях вне зависимости от ядра розыгрыша. Поэтому был сделан вывод о необходимости разработки для МПЧ алгоритма параллелизации, позволяющего учесть вклад в формирование распределения полевых скоростей всех испытаний, проводимых параллельно на задействованных ядрах (процессорах). Такой алгоритм с многократным обменом расчетными данными (синхронизацией) между ядрами на всем протяжении счета был построен и назван алгоритмом параллелизации по статистически независимым испытаниям (ПСНИ). ПСНИ использует стандартную библиотеку передачи сообщений Message Passing Interface (MPI) и дает возможность свести в единое поля скоростей после их корректировки на каждом из ядер.

Алгоритм ПСНИ заключается в проведении испытаний (розыгрыше траекторий), реализуемых сериями по p испытаний в каждой. Испытания в каждой серии реализуются параллельно на p ядрах (по одному испытанию на каждом). Похожая идея параллелизации была предложена для ПММК в [6]. В предлагаемом алгоритме применительно к МПЧ на каждом из задействованных ядер скорости полевых молекул многократно корректируются (при всех столкновениях и отражениях молекул). После каждой серии расчетов между ядрами проводится синхронизация – обмен накопленными изменениями в распределении скоростей полевых молекул. Последующие розыгрыши траекторий на всех ядрах проводятся на едином синхронизированном поле скоростей. Данный алгоритм позволяет учесть вклад всех ядер в формирование поля параметров, получить суммарную картину измененных скоростей после розыгрыша p траекторий и тем самым ускорить процесс установления поля скорости, на котором будут разыгрываться последующие траектории пробных частиц. После окончания всех испытаний, полученные в расчетных ячейках суммарные характеристики передаются на одно из ядер, где ведется обработка результатов – осреднение моментов функции распределения по времени пребывания частиц в ячейках, формирование массивов результирующих полей газодинамических параметров и запись результатов.

С помощью построенного рабочего алгоритма ПСНИ были проведены тестовые расчеты на многоядерном процессоре и сделано сравнение с аналогичными данными последовательного алгоритма МПЧ [17]. Временные затраты для последовательного алгоритма и ПСНИ МПЧ при расчетах на 4-х ядерном процессоре Intel Core 2 Quad Q8400 2,66 GHz с памятью DDR2 4 GBytes PC2-6400 (400 MHz) 2x2048 Mbytes ASUS P5KPL-AM представлены на рисунке 3. Расчетные времена приведены для разных высот: от 200 км (свободномолекулярный режим) до высот, на которых реализуются режимы,

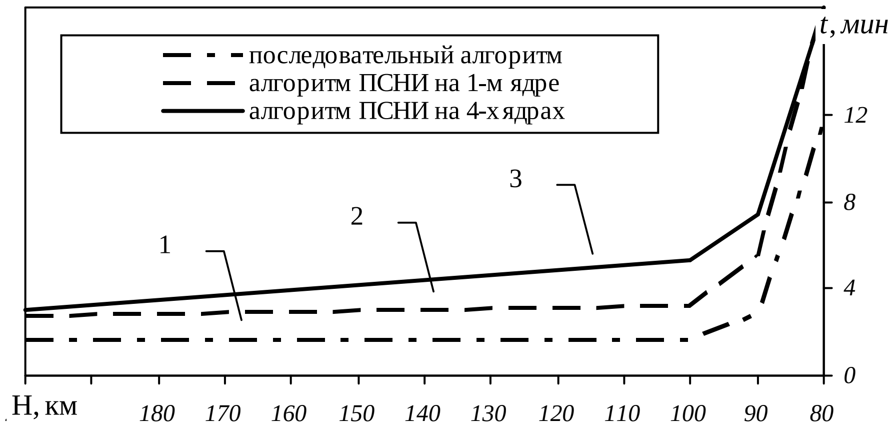

Рис. 3

близкие к сплошносредному (90 – 80 км).

Численные исследования аэрогазодинамических характеристик космических аппаратов (КА) сложной формы при спуске в плотные слои атмосферы Земли с помощью последовательного алгоритма показывают увеличение временных затрат при приближении к сплошносредному режиму обтекания. Это обусловлено тем, что при уменьшении числа Кнудсена в окрестности КА формируется система скачков уплотнения и усиливаются эффекты интерференции. Как видно из рисунка 3, при спуске с высоты 200 км на уровень 80 км время счета последовательного алгоритма (кривая 1) возрастает более чем в 6 раз. Особенно быстрый рост расчетного времени наблюдается на участке между 90 км и 80 км, на котором происходит вход в плотные слои атмосферы и резкое уменьшение числа Кнудсена до $Kn_\infty = 10^{-3}$.

Реализация перехода от последовательного алгоритма к алгоритму ПСНИ на одном ядре во всем рассматриваемом диапазоне высот приводит к почти двукратному увеличению расчетного времени, что показывает сравнение кривых 1 и 2 на рисунке 1. Причиной является то, что хотя обменные процессы при расчетах на одном ядре и отсутствуют, но требуются дополнительные временные затраты на обращение к соответствующим подпрограммам стандарта MPI и выделение необходимых машинных ресурсов.

Сравнение распределенных параметров в окрестности преграды, полученных с помощью ПСНИ на нескольких ядрах при разных режимах обтекания, показывают их полное соответствие данным [17]. Поля относительной плотности ρ/ρ_∞ в окрестности 2-й ступени РН «Циклон-4» при ее спуске на высоту 200 км уже на 1-й итерации показывает хорошее соответствие расчетных данных ПСНИ на 4-х ядрах данным последовательного алгоритма и алгоритма ПСНИ на 1-м ядре (рисунок 4).

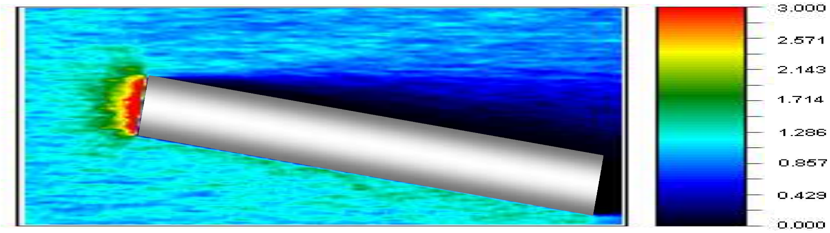

Рис. 4

При спуске на высоту 80 км сходимость результатов достигается на 3 – 4-й итерациях. Поля безразмерной плотности, полученные с помощью алгоритма ПСНИ на разном количестве ядер, идентичны полям ρ/ρ_∞ последовательного алгоритма, представленным на рисунке 5.

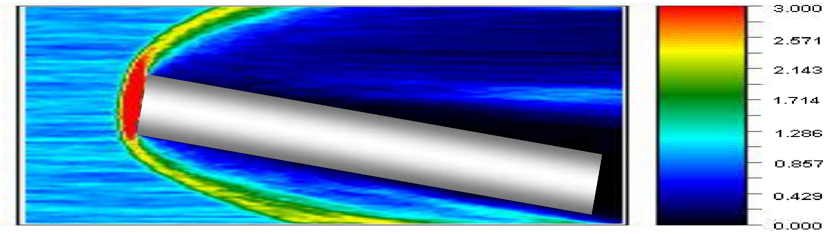

Рис. 5

Таким образом, в задаче внешнего обтекания при расчетах ПСНИ на нескольких ядрах результаты аналогичны данным, полученным на 1-м ядре и данным расчетов последовательного алгоритма при том же количестве испытаний (в отличие от алгоритма ПНП). Переход к алгоритму ПСНИ позволяет достигнуть желаемого результата: количество используемых ядер не влияет на качество получаемых результатов, а влияет только на расчетное время.

Остановимся более подробно на обсуждении временных затрат рассматриваемого алгоритма. При расчетах ПСНИ на нескольких ядрах обменные процессы в зависимости от передаваемой информации осуществляются разово или регулярно. Разовые обмены между ядрами происходят в начале и в конце программы (обмены входными и выходными данными). Регулярная синхронизация составляющих скоростей пробных молекул при изменении распределения их полей является характерной особенностью ПСНИ МПЧ и осуществляется на протяжении всего счета. Время, затрачиваемое на синхронизацию полей, напрямую зависит от организации алгоритма параллелизации. Обмен данными между ядрами может осуществляться путем рассылки на одно, несколько или все ядра и зависит от типа передаваемых данных и особенностей решаемой задачи.

Так как МПЧ является статистическим, то для достижения хорошей статистики в расчетных ячейках количество испытаний должно быть достаточно большим. В зависимости от решаемой задачи число разыгрываемых траекторий колеблется от 10^5 до 10^6. В ходе слежения за траекториями движения при каждом столкновении молекул уточняются компоненты полевых скоростей в соответствующих ячейках, а дальнейшее движение пробных молекул происходит на измененных полях скоростей. Процесс установления распределения полевых скоростей при расчетах ПСНИ на нескольких ядрах приводит к необходимости обмена между ядрами уточненными компонентами скоростей полевых молекул при каждом их изменении в соответствующих ячейках. При уменьшении числа Кнудсена количество столкновений молекул на траекториях слежения растет: на высоте H = 80 км суммарное количество столкновений превышает $1{,}5 \cdot 10^8$ (при 10^6 испытаний). Каждый обмен данными блокирует работу задействованных в нем ядер, поэтому при переходе к расчетам на нескольких ядрах большое количество операций обмена между ядрами очень сильно замедляет процесс счета. Несмотря на то, что передаче подлежит небольшой объем данных (передаются только компоненты скорости и номер корректируемой ячейки), большое количество обменов данными между ядрами нивелирует экономию времени, полученную за счет уменьшения количества операций на ядрах.

Рассмотрим возможные варианты выхода из сложившейся ситуации. Прежде всего, следует отметить, что можно сократить количество обменов между ядрами. Для этого синхронизацию компонентов полевой скорости следует проводить не после их корректировки (т. е. после каждого столкновения или отражения молекул), а после вылета молекулы за пределы расчетной области. В конце каждой траектории движения молекул массивы компонент полевых скоростей, сформированные для всех расчетных ячеек поля, с помощью стандартных подпрограмм MPI собираются со всех ядер на одном из них в результирующие массивы, которые затем рассылаются на остальные ядра. На каждом ядре полученные массивы обрабатываются и формируются новые поля скоростей путем переприсвоения скоростных составляющих. При этом количество обменов (особенно при режимах, близких к сплошносредным) может значительно сократиться, но из-за больших размеров многократно передаваемых массивов, сформированных для всех ячеек сетки, расчетное время ПСНИ на нескольких ядрах значительно превышает время счета последовательного алгоритма.

Кроме того, нет необходимости синхронизировать полевые скорости во всем поле течения, т. е. передавать полные массивы компонент скорости во всех ячейках расчетной сетки. Особенности алгоритма МПЧ позволяют синхронизировать скорости только в тех ячейках расчетного поля, где они корректировались при столкновениях и отражениях молекул, т. е. осуществлять обмен укороченными массивами. Для этого необходимо определить количество таких ячеек, а также сформировать массив их адресов (порядковых номеров) и массивы измененных компонент скорости в этих ячейках. Количество ячеек корректировки N_k не может превышать суммарное количество N ячеек расчетного поля. На каждой траектории N_k значительно меньше N. Определение N_k и формирование соответствующих укороченных массивов передачи должно осуществляться в конце каждой траектории путем перебора всех расчетных ячеек и анализа их параметров. Многократный перебор ячеек расчетной области при этом приводит к большим временным потерям, нивелирующим экономию времени за счет сокращения длины передаваемых массивов.

Чтобы избежать необходимости перебора ячеек, вместо формирования укороченных массивов длиной N_k можно формировать массивы дозаписи. При каждом изменении скорости полевых молекул в них должны фиксироваться (дозаписываться) порядковый номер ячейки, в которой произошло изменение, а также новые компоненты скорости. Длина этих массивов определяется не количеством измененных ячеек, а суммарным количеством столкновений молекул, определяемых режимом обтекания. Данный способ является эффективным (по сравнению с синхронизацией скоростей во всех ячейках сетки) при больших числах Кнудсена и позволяет уменьшить время обмена за счет сокращения длины передаваемых массивов в режимах, близких к свободномолекулярным. При малых числах Кнудсена увеличивается число столкновений и отражений молекул. Так как в одну и ту же ячейку молекула может попасть много раз, то данная ячейка столько же раз может встречаться в списке ячеек корректировки. За счет этого увеличивается длина передаваемых массивов, что в свою очередь приводит к росту временных затрат и машинных ресурсов.

По вышеуказанным причинам время счета ПСНИ не сокращается пропорционально количеству задействованных ядер, как наблюдалось в ПНП, а может увеличиваться. Это подтверждает сравнение расчетных времен ПСНИ на 1-м и 4-х ядрах для разных высот (кривые 2 и 3 на рисунке 1, где синхронизация проводится в конце каждой траектории с помощью массивов дозаписи без их сортировки). При этом полученные поля газодинамических параметров качественно согласуются с аналогичными данными последовательного алгоритма для заданного объема выборки (рисунки 5, 6).

Выходом из сложившейся ситуации может быть сокращение числа синхронизаций (например, проведение синхронизации не после каждого испытания). При синхронизации на каждой 10-й, 100-й и 1000-й траектории массивами скоростей, сформированными для текущей траектории, время счета сокращается (для высоты 80 км данные приведены в таблице 1), но с увеличением шага синхронизации качество полученных изолиний в зоне формирования скачка уплотнения постепенно ухудшается. Такая тенденция является естественной, так как отсутствие учета вклада пропускаемых траекторий ухудшает процесс формирования скоростных полей.

Таблица 1

Высота H, км	Синхронизация после каждого испытания, мин	Синхронизация после каждого 10-го испытания, мин	Синхронизация после каждого 100-го испытания, мин	Синхронизация после каждого 1000-го испытания, мин
80	17,03	5,45	4,01	3,77

Для сохранения качества полученных результатов при сокращении числа синхронизаций необходим обмен массивами, в которых учтены изменения полевых скоростей на протяжении всех пропускаемых между синхронизациями траекторий (условно назовем эти массивы длинными). Соответствующие изолинии безразмерной плотности при таком подходе полностью соответствуют изолиниям последовательного алгоритма и параллельного алгоритма при синхронизации на каждой траектории. Временные затраты для высоты 80 км приведены в таблице 2.

Таблица 2

Высота H, км	Синхронизация после каждого испытания, мин	Синхронизация после каждого 10-го испытания, мин	Синхронизация после каждого 100-го испытания, мин	Синхронизация после каждого 1000-го испытания, мин
80	17,03	17,28	18,79	22,2

При увеличении длины передаваемых массивов время счета растет за счет увеличения времени обмена, что демонстрирует сравнение таблиц 1 и 2.

Увеличение шага пропуска траекторий при обмене длинными массивами сокращает количество обменов. Баланс между временным выигрышем при сокращении количества обменов и проигрышем за счет увеличения длин передаваемых массивов определяет тенденции распределения временных затрат (таблица 2). При синхронизации через 1000 испытаний на высоте 80 км (в отличие от высот H >80 км, где количество столкновений значительно меньше) количество ячеек дозаписи превышает $5{\cdot}10^6$ и вызывает переполнение памяти ПВЭМ. Ограничение количества дозаписываемых элементов (т. е. максимальных размеров передаваемых массивов) до $1{,}5{\cdot}10^6$ сильно ухудшает качество расчетных параметров (рисунок 6). Это подтверждает сравнение изолиний на рисунках 5 и 6.

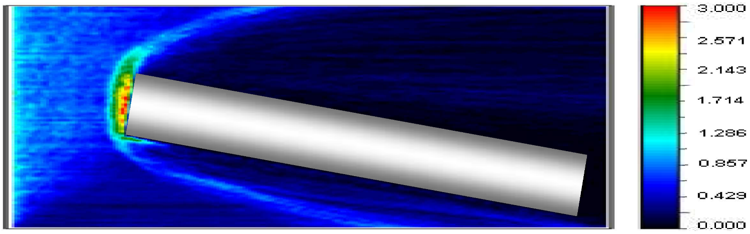

Рис. 6

Чтобы сократить длину передаваемых массивов, можно упорядочить элементы массивов в порядке возрастания порядковых номеров ячеек и исключить ячейки с повторяющимися номерами. Длина сформированных таким образом массивов не может превышать количество ячеек расчетной области. Недостатком такого алгоритма является необходимость многократной сортировки (перед каждой синхронизацией) большого количества элементов массива, что ведет к росту временных затрат. Например, на высоте 80 км для 10^5 испытаний при синхронизации через каждые 100 испытаний время счета составляет ~ 16 минут. Поэтому для 10^6 испытаний временные затраты будут как минимум на порядок выше и проводить эти расчеты не имеет смысла.

Анализ перечисленных выше расчетных вариантов МПЧ дает основание утверждать, что переход к расчетам на нескольких ядрах при использовании алгоритма ПСНИ не позволяет достичь сокращения временных затрат при одновременном сохранении качества полей газодинамических параметров в окрестности обтекаемой преграды. Расчетное время ПСНИ, вопреки ожиданиям, при всех рассмотренных режимах обтекания превосходит время последовательного алгоритма или является соизмеримым с ним. Причиной этого является особенности алгоритма МПЧ, качество расчетов которого напрямую зависит от распределения полевых скоростей, на которых ведется розыгрыш траекторий молекул. Многократная синхронизация скоростных полей алгоритма ПСНИ значительно увеличивают расчетное время. Оптимальный баланс между временными затратами и качеством результатов расчета можно достичь при сокращении числа синхронизаций за счет пропуска части траекторий и осуществления обмена массивами, специально сформированными для ячеек корректировки скоростей на траектории синхронизации.

1. *Берд Г.* Молекулярная газовая динамика / *Г. Берд.* – М. : Мир, 1981. – 319 с.

2. *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.
3. *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.
4. *Воеводин В. В.* Параллелизм в алгоритмах и программах / *В. В. Воеводин* // Вычислительные процессы и системы / под. ред. Г. И. Маргуна. – М. : Наука, 1993. – Т. 10. – С. 253 – 270.
5. *Быков Н. Ю.* Реализация высокоэффективных алгоритмов расчета в программах прямого статистического моделирования задач динамики разреженного газа / *Н. Ю. Быков, Л. Ю. Николаева* // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ2008) : Труды международной научной конференции. – Челябинск : Изд. ЮУрГУ, 2008. – С. 314 – 317.
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 ПММК 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", Черноголовка, 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. *Печерица Л. Л.* Параллельный алгоритм метода пробных частиц для решения задач молекулярной газовой динамики / *Л. Л. Печерица* // Техническая механика. – 2013. – № 1. – С. 32 – 44.
13. *Печерица Л. Л.* Построение оптимальных алгоритмов реализации метода пробных частиц в динамике разреженных газов / *Л. Л. Печерица, Т.Г. Смелая, Н.В. Петрушенко* // Современные проблемы динамики разреженных газов : IV-ая Всероссийская конференция : материалы (26 – 29 июля 2013 г.) – Новосибирск. – С. 164 – 166.
14. *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).
15. Аэрогазодинамическое сопровождение космических проектов / *М. Г. Абрамовская, В. П. Басс, Н. В. Петрушенко, Л. Л. Печерица* // Космічні дослідження в Україні 2004 – 2006. – Київ : ІКД НАНУ-НКАУ, 2006. – С. 78 – 86.
16. *Печерица Л. Л.* Особенности параллельного алгоритма статистически независимых испытаний метода пробных частиц / *Л. Л. Печерица* // Космічні дослідження в Україні 2014 : материалы. – Київ : ІКД НАНУ-НКАУ, 2014. – С. 122.
17. *Басс В. П.* Численное решение трехмерных задач динамики разреженного газа / *В. П. Басс, Л. Л. Печерица* // Техническая механика. – 2010. – № 2 .– С. 38 – 51.
18. *Алексеева Е. В.* Локальный метод аэродинамического расчета в разреженном газе / *Е. В. Алексеева, Р. Г. Баранцев.* – Ленинград : ЛГУ, 1976. – 210 с.

Институт технической механики
Национальной академии наук Украины и
Государственного космического агентства Украины,
Днепропетровск

Получено 16.03.15,
в окончательном варианте 20.05.15