

Реализация высокоэффективных алгоритмов расчета в программах прямого статистического моделирования задач динамики разреженного газа*

Н. Ю. Быков, Л. Ю. Николаева

В работе проанализирована эффективность параллельных алгоритмов расчета методом прямого статистического моделирования (ПСМ) течений разреженного газа. Рассмотрена целесообразность применения различных типов параллельных алгоритмов для решения нестационарных задач расширения пара кластерообразующего вещества в вакуум (или газ низкого давления), а также для расчета пространственных течений паров воды во внутренней атмосфере комет.

1. Введение

Типичными приложениями теории динамики разреженного газа являются аэродинамика космических летательных аппаратов (КЛА) в верхних слоях атмосферы, газодинамика расширяющихся течений от испаряющихся поверхностей или сопел микродвигателей КЛА в вакууме, газодинамика внутренних течений в вакуумных системах и пр. Сфера практических интересов Центра перспективных исследований СПбГПУ связана с двумя характерными задачами, имеющими непосредственное отношение к динамике разреженного газа - лазерной абляцией (ЛА) твердых веществ в вакуум или буферный газ низкого давления [1-3] и моделированием движения паров воды во внутренней атмосфере комет [4,5]. Наиболее адекватным физике данных задач в интересующем диапазоне определяющих параметров инструментом расчета является метод прямого статистического моделирования Монте-Карло (ПСМ). Цель настоящей работы - предварительный анализ существующих параллельных алгоритмов расчета методом ПСМ с целью их последующего использования при моделировании течений в атмосфере комет и при ЛА конденсированных веществ.

Технологии лазерного испарения материала рассматриваются нами как способ получения наноматериалов (непосредственно наночастиц, либо пленок, содержащих кластеры). Вычислительных проблем, связанных с расчетом методом ПСМ течений с процессами конденсации (кластерообразования) при ЛА, несколько. Во-первых, в рассматриваемом диапазоне определяющих параметров необходима реализация в расчете не менее 10^7 - 10^8 вычислительных частиц. Число вычислительных частиц определяет требования к объему оперативной памяти и быстродействию компьютера. Во-вторых, физика задачи требует с одной стороны моделирования процесса в значительном временном диапазоне, с другой стороны использование небольшой величины временного шага для корректной работы модели кластеризации. К особенностям задачи относится ее нестационарный характер и осесимметричная (двумерная) постановка. Расчет типичного варианта задачи о расширении пара кластерообразующего вещества в буферном газе методом ПСМ занимает около 10 дней работы однопроцессорного персонального компьютера с тактовой частотой 2100МГц.

Задача о моделировании внутренней атмосферы комет имеет важное значение для понимания физики комет в целом, и в частности, для проектирования КЛА, предназначенных для исследования данных небесных объектов (например, в рамках проекта Rosetta). Расчет данной задачи методом ПСМ в зависимости от основных параметров (например, от расстояния кометы до Солнца, определяющего интенсивность излучения и потоки испаряющихся молекул воды с поверхности) также требует использования большого числа вычислительных частиц. Моделирование осложняется необходимостью учета дополнительных процессов – вращения кометы, неоднородного нагрева ее поверхности, неоднородной структурой поверхности, наличием про-

* Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ N 07-01-00354-а

цессов конденсации в потоке, присутствием частиц пыли и пр. Полное решение данной задачи для любой кометы, движущейся по произвольной орбите, находится в настоящий момент на грани пределов вычислительной техники. К особенностям задачи относится в общем случае ее нестационарный и трехмерный характер.

Таким образом, эффективное компьютерное моделирование рассматриваемых задач требует разработки соответствующих алгоритмов расчета. Параллельные алгоритмы расчета методом прямого статистического моделирования хорошо известны [6-13].

2. Параллельные алгоритмы ПСМ

В настоящее время существует ряд параллельных алгоритмов ПСМ для суперкомпьютеров различной архитектуры, использующих те или иные способы декомпозиции. Условно можно выделить четыре типа параллельных алгоритмов ПСМ.

Первый тип – параллелизация по крупным независимым подзадачам. Такой метод, например, реализован при параллелизации ПСМ нестационарных течений в работе [7]. Идея алгоритма заключается в расчете независимых реализаций ПСМ на параллельно работающих процессорах (алгоритм прямых статистически независимых испытаний (ПСНИ)). Крупнозернистость данного алгоритма позволяет получать очень высокие ускорения и эффективность.

Второй тип – пространственная декомпозиция расчетной области. Расчетная область разбивается на неперекрывающиеся подобласти, которые назначаются соответствующим процессорам. Расчеты течений в каждой из подобластей рассматриваются как отдельные подзадачи, решаемые параллельно. В этом случае, процессы столкновения частиц и их перенос осуществляется каждым процессором независимо от других, и обмен информацией между процессорами состоит в обмене частицами, покидающими или поступающими в подобласти. Примеры этих алгоритмов представлены в работах [8-11].

Третий тип – параллелизация по данным. Анализируя алгоритм ПСМ, можно заметить, что существенная взаимосвязь данных имеется только в процедурах столкновений и переадресации. Эта взаимосвязь локализована внутри отдельных ячеек. Следовательно, в большей части алгоритма данные можно разделить между процессорами и использовать параллельно. Примерами параллельных алгоритмов ПСМ данного типа являются работа [12]. В [12] каждый процессор моделирует перенос порции частиц, а затем столкновение частиц в выделенной ему порции ячеек. Существенным ограничением данного алгоритма является его применимость только для машин с общей памятью.

Четвертый тип – комбинированная декомпозиция, включающая различные сочетания рассмотренных типов параллелизации. Примером разработок данного типа является, например, работа [13]. Представленный в этой работе алгоритм сочетает параллелизацию по крупным независимым подзадачам и параллелизацию по данным внутри каждой подзадачи.

3. Оценка эффективности параллельных алгоритмов ПСМ

В настоящее время наибольшее распространение получили алгоритмы параллелизации второго типа. Это связано с их универсальностью относительно задач, решаемых методом ПСМ и относительной независимостью от архитектуры компьютера.

Вопрос, связанный с использованием конкретных типов вычислительных алгоритмов для рассматриваемых задач, должен учитывать их нестационарный характер. Одним из оптимальных параллельных алгоритмов расчета нестационарных задач методом ПСМ является метод ПСНИ. На рис.1 (кружки) показано ускорение S_p (а) и эффективность E_p (б) алгоритма ПСНИ при решении задачи ЛА материала в вакуум для параллельного компьютера Parsytec. При реализации алгоритма на $p=4,8$ и 16 процессорах доля параллельных вычислений α составила 0.989. На рис.1 (кривые 1) приведены теоретические кривые ускорения и эффективности для числа процессоров до 28, полученные с использованием полученного значения α и известных соотношений

$$S_p = \frac{p}{p - \alpha(p-1)} \quad (1)$$

$$E_p = \frac{1}{(1-\alpha)p + \alpha}. \quad (2)$$

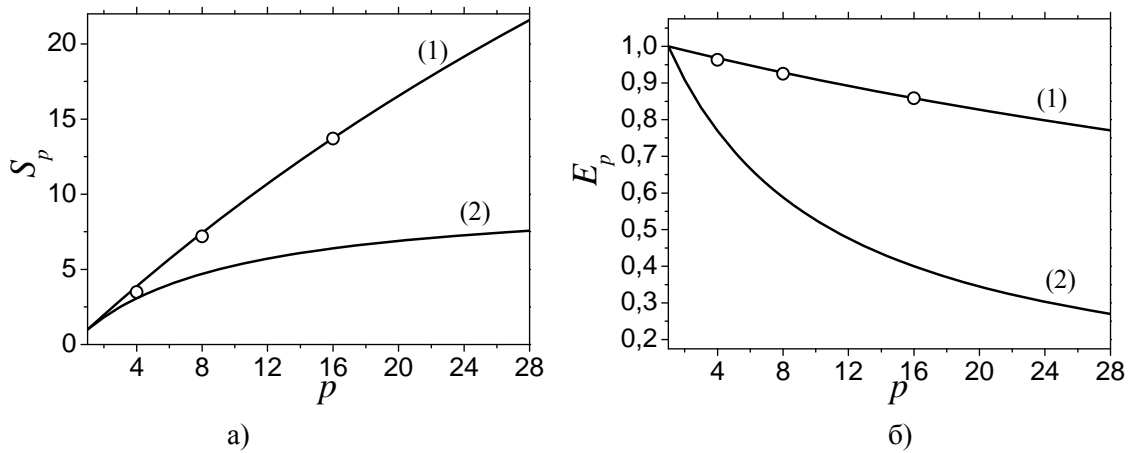


Рис. 1. Ускорение и эффективность параллельных алгоритмов

Алгоритм ПСНИ является крупнозернистым, обеспечивает оптимальную загрузку процессоров и является весьма эффективным для решения рассматриваемых задач. Однако, к его недостаткам относится большой объем требуемой оперативной памяти, приходящийся на каждый процессор. Фактически данный объем равен объему оперативной памяти V_1 , требующемуся для решения задачи на однопроцессорном компьютере. В случае если объем памяти, которым располагает каждый процессор в системе с локальной памятью V_{lp} , окажется меньше V_1 решение задачи оказывается не возможным. Так, в случае если $V_{lp} = 256$ Мб возможен расчет рассматриваемых задач с числом вычислительных частиц до 10^7 , что является нижней границей, приемлемой для моделирования лишь ряда простых вариантов.

Алгоритмы декомпозиции расчетной области позволяют избежать данных ограничений, так как в общем случае условие возможности расчета по объему имеющейся оперативной памяти выглядит как $pV_{lp} > V_1$. При $V_{lp} = 256$ Мб и 10 процессорной системе возможен расчет с числом вычислительных частиц до 10^8 . Алгоритмы декомпозиции с динамической балансировкой процессоров хорошо зарекомендовали себя при решении стационарных задач. Однако к особенностям рассматриваемых задач относится их нестационарный характер, наличие в поле течения быстро движущихся зон (фронта течения, слоев смешения, ударных волн и пр.) Указанные факторы приводят к разбалансировке работы процессоров и уменьшению доли параллельных вычислений. Доля параллельных вычислений в зависимости от типа задачи и значений определяющих параметров оценивается нами в диапазоне 0.7-0.95. На рис. 1 (кривые 2) приведены теоретические зависимости ускорения и эффективности для $\alpha = 0.9$. Разработка алгоритма декомпозиции расчетной области с динамической балансировкой процессоров для нестационарных задач будет реализована нами в ближайшем будущем.

4. Заключение

Рассматриваемые нами задачи динамики разреженного газ – о расширении пара кластерообразующего вещества в вакуум или газ низкого давления при ЛА с учетом процессов формирования наночастиц в поле течения и о параметрах внутренней атмосферы вращающейся кометы, движущейся по реальной орбите, являются нестационарными и требуют при моделировании методом ПСМ значительного объема оперативной памяти. В случае если объем памяти, приходящийся на один процессор в системе с локальной памятью, достаточен для моделирования, рекомендуется использование параллельного алгоритма ПСНИ, в противном случае методы, основанные на декомпозиции расчетной области, не имеют альтернативы.

Литература

1. N.Yu. Bykov, N.M. Bulgakova, A.V. Bulgakov, G.A. Loukianov. Pulsed laser ablation of metals in vacuum: DSMC study versus experiment / Applied Physics A: Materials Science and processing. – Vol.79 (2004) - p.1097-1100.
2. Быков Н.Ю., Лукьянов Г.А. Прямое статистическое моделирование импульсной лазерной абляции металлов с процессами кластеризации в испаренном облаке // Теплофизика и аэромеханика. – 2006. – Т. 13. - № 4. – С. 569-582.
3. Н. Ю. Быков, Г.А. Лукьянов, Л. Ю. Николаева. Моделирование процессов образования нанокластеров и их напыления на подложку при импульсной лазерной абляции металлов // Приборостроение (Известия Вузов). 2008 (в печати)
4. Н.Ю. Быков, Ж.-Ф. Крифо, Г.А. Лукьянов. Моделирование теплового состояния и внутренней атмосферы вращающейся кометы// Математическое моделирование.- 2003. – Т.15.- №6.-С.33-34.
5. Gr.O. Khanlarov, G.A. Lukianov. DSMC of the Inner Atmosphere of a Comet on Shared Memory Multiprocessors. Lecture Notes in Computer Science. Vol. 1593. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg new York (1999)
6. В.В. Захаров, Г.А. Лукьянов, Гр.О.Ханларов. Параллельные алгоритмы прямого моделирования Монте Карло в молекулярной газовой динамике. С.Петербург, Институт высокопроизводительных вычислений и баз данных. Методическое пособие для пользователей. 1999.
7. Н.Ю.Быков, Г.А. Лукьянов. Параллельное прямое моделирование Монте-Карло нестационарных течений разреженного газа на суперкомпьютерах массивно-параллельной архитектуры. Санкт-Петербург, Институт высокопроизводительных вычислений и баз данных. Препринт № 5-97. 1997.
8. T.R. Furlani, J.A. Leonardi. A comparison of parallel algorithms for the direct simulation Monte-Carlo Method II: Application to Exhaust Plumes Flowfields // AIAA Paper 89-1167, June 1989
9. R.G. Wilmoth. Adaptive Domain Decomposition for the Monte Carlo Simulations on Parallel Processor. In 17th Rarefied Gas Dynamics Symposium. AiAA, July 1990.
10. M. Ivanov, G. Markelov, S. Taylor, J. Watts. Parallel DSMC Strategies for 3D Computations. Parallel CFD'96. P. Schiano et al. eds, North Holland, Amsterdam, 1997, pp. 485-492
11. M.S. Ivanov, G.N. Markelov. Efficient Algorithms of Statistical Simulation of Rarefied Flows on Parallel Computers // Proc. 8th Int. Conf. On the Methods of Aerophysical Research. Novosibirsk. 1996. V.3. PP.103-108
12. И.А. Гришин, В.В. Захаров, Г.А. Лукьянов. Параллелизация по данным прямого моделирования Монте-Карло в молекулярной газовой динамике. С.Петербург, Институт высокопроизводительных вычислений и баз данных. Препринт № 3-98. 1998
13. А.В. Богданов, Н.Ю. Быков, И.А. Гришин, В.В. Захаров, Г.А. Лукьянов, Гр.О.Ханларов. Алгоритмы двухуровневой параллелизации ПММК для решения нестационарных задач молекулярной газовой динамики. С.Петербург, Институт высокопроизводительных вычислений и баз данных. Препринт № 10-98. 1998.