

УДК 533.6.011.8, 004.421.2

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДОВ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ЗАДАЧАХ ДИНАМИКИ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ

Ю.А. НИКИТЧЕНКО, Ю.А. РЫЖОВ, С.А. ПОПОВ, О.Ю. ВЛАСОВ

Рассматриваются различные варианты синхронизации параллельных вычислительных процессов на примере решения задачи о свободномолекулярном течении внутри прямоугольного канала методом Монте-Карло.

Ключевые слова: коэффициент Клаузинга, метод Монте-Карло, технология MPI.

Введение

Задачи динамики разреженных газов, решаемые методом прямого статического моделирования, требуют больших вычислительных ресурсов. Современные тенденции в этой области связаны, прежде всего, с многопроцессорной (параллельной) обработкой данных. На сегодняшний день существует ряд методов распараллеливания вычислительного процесса. Эффективность того или иного метода распараллеливания в значительной мере связана с применяемым методом численного решения газодинамической задачи.

Настоящая работа ставит своей целью количественную оценку процессорного времени, необходимого для одно- и многопроцессорного расчета коэффициента Клаузинга (вероятности прохождения молекулы через канал) в свободномолекулярной области течения газа.

В качестве метода распараллеливания будет рассматриваться технология MPI (Message Passing Interface). В качестве метода численного решения – метод прямого статистического моделирования (метод Монте-Карло) в простейшей реализации. Будет рассматриваться канал прямоугольного сечения с различным соотношением геометрических параметров.

1. Постановка задачи

Схема канала в прямоугольной декартовой системе координат показана на рис. 1.

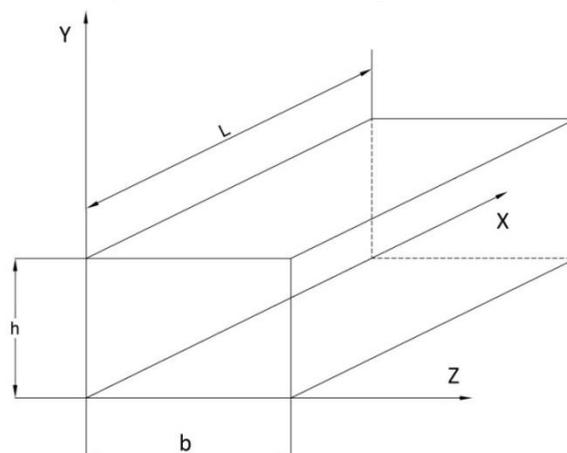


Рис. 1. Схема канала

Здесь использованы обозначения работы [1]. Получаемые значения коэффициента Клаузинга сравнивались с результатами решения соответствующего интегрального уравнения (уравнение Клаузинга), приведенными в той же работе.

Рассматривается столкновение молекул только со стенками канала (свободномолекулярное течение). На поверхности канала принимается диффузный закон отражения молекул. Во вход-

ном сечении канала (плоскость $x=0$) принимается равновесное состояние газа, соответствующее максвелловской функции распределения молекул по скоростям.

В точке взаимодействия молекулы с поверхностью используется локальная сферическая система координат, показанная на рис. 2.

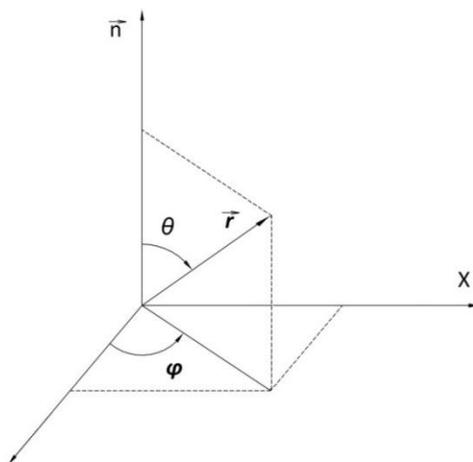


Рис. 2. Локальная сферическая система координат

В этой системе \vec{n} – внешняя нормаль к рассматриваемой поверхности, ось X соответствует одноименной оси декартовой системы координат (рис. 1). Положительные направления измерения меридианального (θ) и азимутального (φ) углов показаны на рисунке.

Коэффициент Клаузинга определен следующей зависимостью

$$W = \frac{N_L}{N_0}, \quad (1)$$

где N_0 – количество молекул, вошедших в канал через сечение $x=0$;

N_L – количество молекул, вышедших из канала через сечение $x=L$.

Среднее квадратическое отклонение значения W при большом количестве испытаний (N_0) определяется следующей зависимостью [2]

$$\sigma_w = \sqrt{\frac{W(1-W)}{N_0}}. \quad (2)$$

2. Метод численного решения

Структурная схема расчета представлена на рис. 3.

Исходные данные задаются в блоках 2 и 3. Далее вычисляются координаты старта y_0, z_0 (блок 4):

$$\begin{aligned} y_0 &= h\xi; \\ z_0 &= b\zeta, \end{aligned}$$

где ξ и ζ – непрерывные случайные числа, равномерно распределенные в интервале $[0; 1]$, генерируемые датчиком случайных чисел.

Направления траектории движения молекулы в сферической системе координат (блок 5) задаются углами φ и θ (рис. 2). Углы φ и θ задаются аналогично координатам старта y_0 и z_0 . Углы меняются в следующих пределах:

$$\begin{aligned} 0^0 &\leq \varphi \leq 360^0; \\ 0^0 &\leq \theta \leq 90^0. \end{aligned} \quad (3)$$

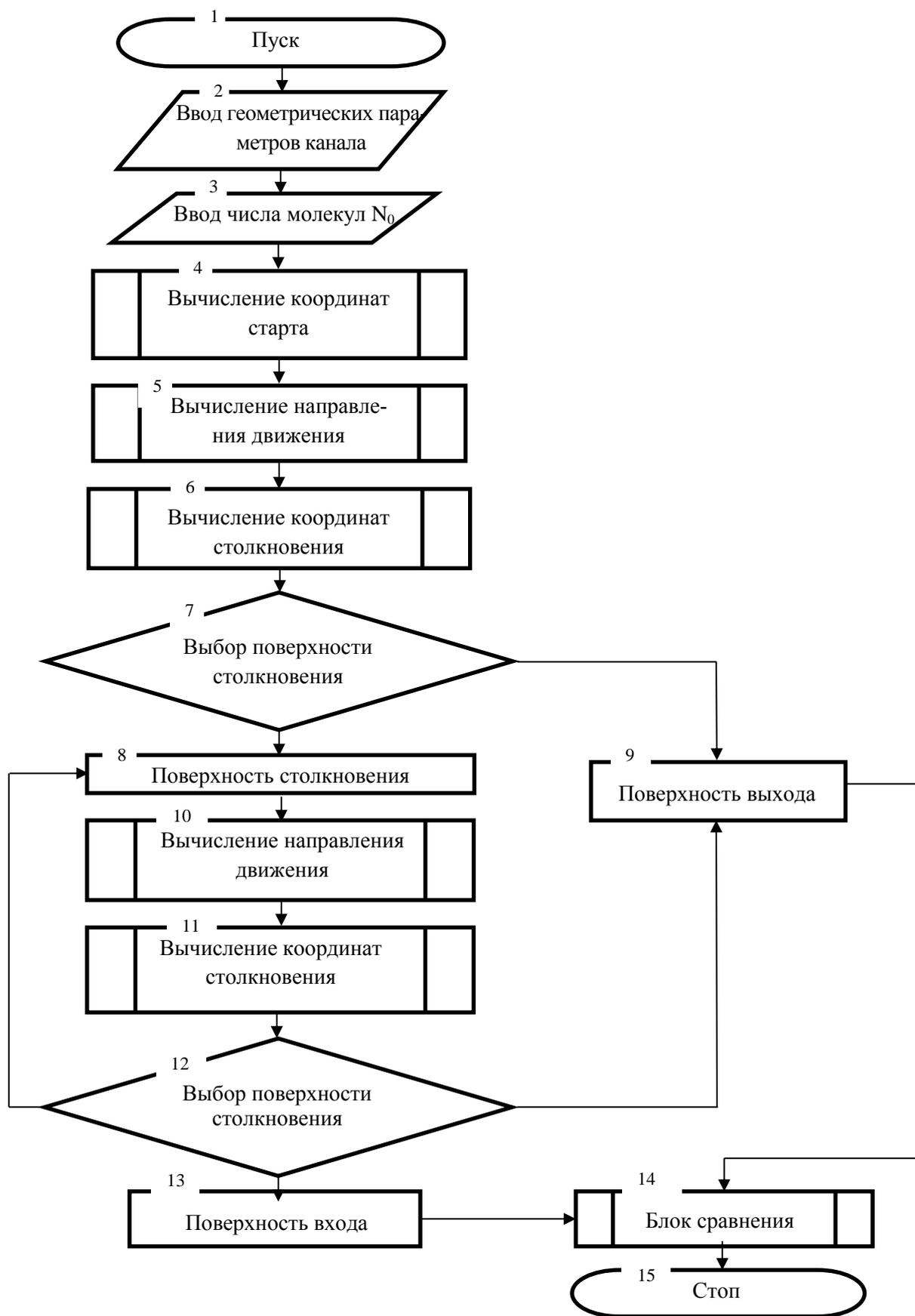


Рис. 3. Структурная схема численного решения

Величина молекулярной скорости не существенна для данной задачи, поскольку не влияет на коэффициент Клаузинга. Она принимается равной 1.

В блоке 6 вычисляются координаты столкновения молекулы со всеми поверхностями канала совместным решением уравнения прямой и уравнения соответствующей поверхности.

В блоке 7 поверхность столкновения выбирается из тех соображений, что точка пересечения траектории движения молекулы и поверхности канала не выходит за пределы последнего. При попадании молекулы в выходное сечение ($x=L$) её движение считается окончанным, т.е. к числу N_L и к числу рассмотренных молекул N прибавляют по единице (блок 9). Сравниваются значения N и N_0 (блок 14). Если число N оказывается равным N_0 , то расчет заканчивается, если же N меньше этого числа, то рассматривается движение следующей молекулы с момента старта (блок 4). При попадании молекулы на стенку снова определяется направление движения (блок 10) для молекулы, стартующей с поверхности канала.

В блоке 11 вычисляются координаты столкновения молекул с поверхностями канала, как в блоке 6. В зависимости от координат столкновения молекула может попасть на поверхность выхода (блок 9), поверхность входа (блок 13) или снова на стенку канала. При попадании на стенку канала или поверхность выхода процесс расчета ведется согласно рассмотренной выше процедуре. При попадании молекулы на поверхность входа (блок 13) движение молекулы считается также окончанным, прибавляется единица к числу N , но число N_L остается без изменений.

По окончании расчетов по формулам (1) и (2) находятся искомым коэффициент Клаузинга и среднее квадратическое отклонение.

3. Метод организации многопроцессорных вычислений

Эффективность вычислений, в смысле необходимого для решения поставленной задачи времени, в значительной степени определяется методом организации многопроцессорной обработки данных. Одной из основных характеристик метода является наличие или отсутствие синхронизации параллельных вычислительных процессоров. Необходимость в такой синхронизации (установки синхронизирующего *барьера* или просто – *барьера*) определяется содержанием и методом решения самой задачи.

Расчет коэффициента Клаузинга при прохождении свободномолекулярного потока через канал относится к задачам, позволяющим организовать процесс вычислений без установки барьера. Представляет интерес сравнение вычислительной эффективности решения данной задачи при различных вариантах установки барьера и без него.

Алгоритм, не использующий установку синхронизирующего барьера («безбарьерный алгоритм»), заключается в следующем. Исходное множество (число молекул N_0) разбивается на равновеликие подмножества. Количество таких подмножеств равно числу задействованных процессоров n_p . Количество элементов подмножества

$$M = \frac{N_0}{n_p}.$$

Количество элементов (размер) множества N_0 выбирается кратным числу процессоров n_p . Расчеты проводились на одном, двух, трех и четырех процессорах. В связи с этим размер множества N_0 был кратен двенадцати.

Алгоритм с синхронизирующим барьером («циклический алгоритм») организован следующим образом. Реализуются циклические вычисления. Задается количество молекул M , рассматриваемое одним процессором на одном цикле. Отметим, что значение M , определенное зависимостью (5), соответствует количеству молекул, рассчитываемому одним процессором на одном, единственном цикле.

Общее количество молекул, траектории которых рассчитываются в одном цикле

$$N_c = M \cdot n_p. \quad (4)$$

Количество циклов n_c определяется очевидным соотношением

$$n_c = \frac{N_0}{N_c}.$$

Здесь N_0 выбирается кратным N_c .

Количество синхронизирующих барьеров на единицу меньше количества циклов.

Ниже приводится последовательность процедур технологии MPI, реализованная в данной работе. Более подробное описание процедур можно найти, например, в работе [3].

Поскольку каждый процесс считается независимо друг от друга, то общие параметры для задачи задаются до начала непосредственного расчета. После этого производится инициализация MPI с помощью процедуры:

`MPI_Init(ierr)`,

где `ierr` – переменная, в которую записывается код ошибки.

Затем производится определение размера вычислительного пространства с помощью процедуры:

`MPI_Comm_size(comm, size, ierr)`,

где `comm` – коммуникатор. В данной задаче в качестве переменной `comm` использовалось значение `MPI_COMM_WORLD` – предопределённого коммуникатора, соответствующего всем процессам параллельной системы;

`size` – переменная, в которую будет сохранено общее число процессов в коммуникаторе.

При инициализации MPI каждому процессу присваивается номер от 0 до (`size - 1`). Номер для каждого процесса можно определить с помощью вызова процедуры:

`MPI_Comm_rank(comm, rank, ierr)`,

где `rank` – переменная, в которую будет сохранен номер процесса, вызвавшего эту процедуру в коммуникаторе `comm`.

Для замера времени расчета на процессе с номером 0 переменной t с помощью функции `MPI_Wtime()` присваивается начальное значение времени. После этого каждый процесс начинает расчет своего подмножества молекул. Для использования барьера используется процедура `MPI_Barrier(comm, ierr)`, которая блокирует вызывающий процесс до тех пор, пока все аргументы, входящие в коммуникатор, переданный в качестве аргумента, также не выполнят этот вызов.

По окончании расчетов все процессы передают на процесс с номером 0 данные о том, сколько молекул прошли через канал, т.е. вылетели через выходное сечение, и они суммируются. Всё это делается с помощью одной процедуры:

`MPI_Reduce(sendbuf, recvbuf, count, datatype, op, root, comm)`;

`sendbuf` – адрес буфера сообщения для отправки;

`recvbuf` – адрес буфера для сохранения результата операции;

`count` – число элементов данных в буфере;

`datatype` – тип элементов данных в буфере;

`op` – бинарная операция. В данной задаче используется предопределенная редуктивная операция `MPI_SUMM`, вычисляющая сумму всех `count` элементов из `sendbuf`;

`root` – номер процесса в коммуникаторе `comm`, на котором формируется результат операции;

`comm` – коммуникатор, по которому выполняется операция `op`.

Полученное значение количества молекул, пролетевших через канал, «нулевой» процесс делит на общее число молекул, т.е. находится искомым коэффициент Клаузинга W по формуле (1). Также определяется среднее квадратическое отклонение σ по формуле (2). Затем на процессе с номером 0 снова вызывается функция `MPI_Wtime()`, и из нового значения для переменной t вычитается предыдущее. Таким образом, мы получаем время расчета.

4. Результаты расчета

Расчеты проводились на 4-ядерном процессоре Intel Core i7-3612QM, имеющем тактовую частоту 2.1 ГГц. В качестве интерфейса MPI была использована библиотека MPICH2 версии 3.0.4 с сайта Аргоннской национальной лаборатории [4].

На первом этапе расчет проводился только по безбарьерному алгоритму для каналов разного удлинения λ . Удлинение канала определялось по зависимости

$$\lambda = \frac{L}{b}. \quad (1)$$

Размер исходного множества, т.е. количество рассчитываемых молекул, составлял $N_0 = 1,2 \cdot 10^6$. Полученные коэффициенты Клаузинга удовлетворительно согласуются с результатами решения интегрального уравнения [1]. В табл. 1 приведены значения полученных коэффициентов W и соответствующие им среднеквадратические отклонения σ для $b/h = 4$.

Таблица 1

Значения коэффициента Клаузинга при различных удлинениях канала

λ	50	100	250
W	$5,81 \cdot 10^{-2}$	$4,07 \cdot 10^{-2}$	$2,58 \cdot 10^{-2}$
σ	$7,40 \cdot 10^{-5}$	$6,25 \cdot 10^{-5}$	$5,02 \cdot 10^{-5}$

На рис. 4 представлена зависимость времен расчета от количества процессоров при различных удлинениях канала.

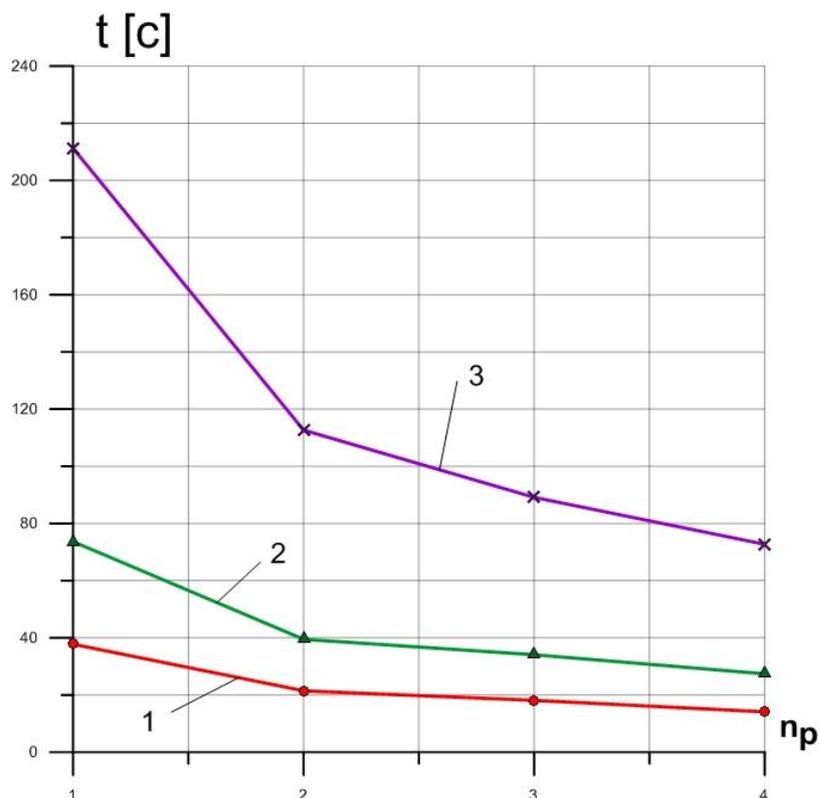


Рис. 4. Зависимость времени расчетов t от числа процессоров n_p . Количество молекул $N_0 = 1,2 \cdot 10^6$; 1 – $\lambda = 50$; 2 – $\lambda = 100$; 3 – $\lambda = 250$

Из графиков видно, что сокращение времени расчета почти прямо пропорционально количеству процессоров. Многопроцессорная обработка в этом случае целесообразна и весьма эффективна.

Из рис. 4 также следует, что удлинение канала существенно влияет на потребное время расчета. Этот факт, очевидно, связан с тем, что в каналах большего удлинения молекула испытывает большее количество переотражений на стенках канала, что и приводит к увеличению времени расчета.

Из данных табл. 1 следует, что при удлинении канала $\lambda=50$ среднеквадратическое отклонение вычисления коэффициента Клаузинга имеет вполне приемлемую для практических вычислений величину. Расчеты по циклическому алгоритму проводились только для этого удлинения.

На рис. 5 представлены результаты расчетов по циклическому алгоритму при различном количестве M элементов подмножества. Для сравнения приведена кривая расчета по безбарьерному алгоритму (кривая 1 на рис. 4). Из графика видно, что при возрастании M длительность расчета стремится к длительности расчета безбарьерного алгоритма. Этот факт обусловлен следующими обстоятельствами. Число M принимает максимальное значение в случае безбарьерной обработки. При использовании четырех процессоров $M=3 \cdot 10^5$. Увеличение M в случае циклического алгоритма уже само по себе приближает этот алгоритм к безбарьерному.

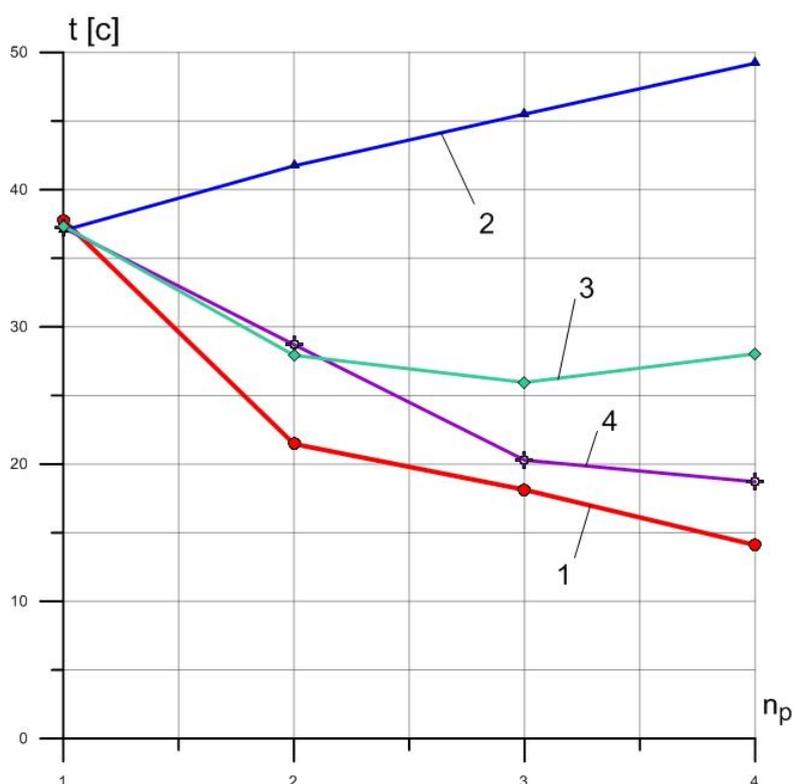


Рис. 5. Зависимость времени расчета t от числа процессоров n_p .

Удлинение канала $\lambda=50$; 1 – безбарьерный алгоритм; 2 – $M=1$; 3 – $M=10$; 4 – $M=100$

Вместе с тем имеет место снижение негативного влияния синхронизирующего барьера на продолжительность вычислительного процесса. Движение молекулы в канале носит характер «случайных блужданий». Для различных молекул длительности этих процессов существенно отличаются.

Негативное действие синхронизирующего барьера заключается в том, что процессоры, закончившие расчет своих M траекторий, «ждут» наиболее «медленный», т.е. выполняющий наибольшее количество вычислительных операций, процессор. Таким образом, продолжительность расчета каждого цикла определяется «медленным» процессором.

Кривая 2 ($M=1$) наглядно иллюстрирует этот факт. Увеличение числа процессоров замедляет вычислительный процесс. Увеличение числа молекул, рассчитываемых одним процессором на одном цикле, т.е. числа M , ведет к уменьшению разницы продолжительностей расчетов на

отдельных процессорах за счет осреднения этих продолжительностей. Уже при $M=10$ циклический алгоритм имеет некоторое преимущество перед однопроцессорным расчетом.

Отметим также и тот факт, что увеличение M уменьшает количество циклов и, следовательно, количество синхронизирующих барьеров.

Выводы

Установка синхронизирующего барьера, являющегося необходимым элементом ряда вычислительных методов, снижает эффективность параллельных вычислений. В отдельных случаях негативное действие синхронизирующего барьера может привести к замедлению вычислительного процесса, даже по отношению к однопроцессорной обработке.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кошмаров Ю.А., Рыжов Ю.А. Прикладная динамика разреженного газа. – М.: Машиностроение, 1977.
2. Саксаганский Г.Л. Молекулярные потоки в сложных вакуумных структурах. – М.: Атомиздат, 1980.
3. Лупин С.А., Посыпкин М.А. Технологии параллельного программирования. – М.: ИД «ФОРУМ»: ИНФРА-М, 2011.
4. Argonne National Laboratory. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.mpich.org/>.

EVALUATION OF PARALLELIZATION METHODS PERFORMANCE IN THE RAREFIED GAS DYNAMICS

Nikitchenko Yu.A., Ryzhov Yu.A., Popov S.A., Vlasov O.Yu.

This article analyzes different ways to synchronize parallel computing processes in the context of solving the task about a free molecular flow in a rectangular channel by the Monte Carlo method.

Keywords: clausing factor, the Monte Carlo method, MPI technology.

Сведения об авторах

Никитченко Юрий Алексеевич, 1952 г.р., окончил МГТУ им. Н.Э. Баумана (1977), доцент, кандидат технических наук, доцент кафедры СМ-3 МАИ, автор более 30 научных работ, область научных интересов – динамика неравновесных течений.

Рыжов Юрий Алексеевич, 1930 г.р., окончил МФТИ (1954), профессор, доктор технических наук, академик РАН, главный научный сотрудник, заведующий кафедрой аэродинамики летательных аппаратов МАИ, автор более 100 научных работ, область научных интересов – аэродинамика сверхзвуковых скоростей, динамика разреженного газа, взаимодействие частиц атомного масштаба с поверхностью, неравновесные процессы в потоке газа, нестационарный теплообмен.

Попов Сергей Александрович, 1967 г.р., окончил МАИ (1989), кандидат физико-математических наук, доцент МАИ, заместитель заведующего кафедрой аэродинамики летательных аппаратов МАИ, автор 15 научных работ, область научных интересов – динамика разреженного газа и вычислительная гидродинамика.

Власов Олег Юрьевич, 1992 г.р., студент МАИ, область научных интересов – аэродинамика ЛА.