

Секция «Вычислительная математика и кибернетика»

Применение параллельных алгоритмов для ускорения моделирования физических процессов на вычислительных кластерах и способы

уменьшения времени моделирования

Подольский Владимир Эдуардович

Студент

Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана,

Информатика и системы управления, Красногорск, Россия

E-mail: v.e.podolskiy@gmail.com

Моделирование физических процессов в условиях растущей сложности естественнонаучных задач становится вызовом для вычислительной техники. Помочь учёным с этой проблемой предназначены суперкомпьютеры и вычислительные кластеры.

Узким местом вычислительных кластеров является пересылка сообщений. Из-за неё наблюдается рост времени обработки заданий, в частности таких заданий как моделирование физических процессов с большим числом объектов.

На примере броуновского движения частиц опишем кластерную архитектуру для моделирования физического процесса движения молекул и укажем её модификации для увеличения производительности.

Для решения задачи моделирования броуновского движения лучше всего воспользоваться архитектурой кластерных вычислений типа master-slave, где нулевой процесс (master) осуществляет ввод информации, предварительный расчёт начальных условий и инициализацию пространства для моделирования, а также перераспределение частиц между остальными процессорами.

После окончания инициализации плоскость, на которой проводится эксперимент, разбивается при помощи заранее заданной сетки на N_{sp} частей. Каждая такая часть соответствует одному из slave-процессов. Master-процесс производит пересылку slave-процессу записей о тех молекулах, которые находятся в соответствующей slave-процессору ячейке (пространственное, топологическое распараллеливание). Так как молекулы хаотично движутся и могут перемещаться по всему пространству площадью S , то необходимо предусмотреть пересылку информации о молекулах, подошедших вплотную к границе между процессами, которые и разделяет эта граница. По окончании процесса моделирования все slave-процессы пересылают свои блоки информации о молекулах master-процессу. После этого нулевой (master) процесс и выводит полученную информацию в файл для дальнейшего анализа. Отметим, что также можно снимать через равные интервалы времени моделирования показания со slave-процессов, чтобы потом построить траектории движения взвешенных молекул. Описанная параллельная архитектура представлена на рисунке 1.

Для получения временных параметров алгоритма были написаны последовательная и параллельная программы. Программы были протестированы на кластере производства фирмы IBM. Было проведено по 10 экспериментов для каждого из 15 вариантов площадок экспериментального ряда (S , нм^2 : 0,01; 0,04; 0,09; 0,16; 0,25; 0,36; 0,49; 0,64; 0,81; 1,00; 1,21; 1,44; 1,69; 1,96; 2,25). Усреднённые результаты в виде графиков (последовательная версия и параллельные версии для 5, 10, 17, 26 процессоров, из которых один

– master-процессор) представлены на рисунке 2. На рисунке 3 представлена дисперсия по времени.

На рисунке 4 представлены графики ускорений параллельных версий по отношению к последовательной. В случае использования 26 процессоров достигается практически 6-кратное ускорение. При увеличении числа процессоров и площади моделируемой области ускорение увеличится вследствие уменьшения числа пересылок.

Существует несколько возможностей по дальнейшему ускорению процесса моделирования на высокопроизводительной параллельной аппаратуре за счёт уменьшения времени, затрачиваемого на пересылку сообщений между процессорами. Пара таких способов, не вошедших в тезисы ввиду ограничения на объём, разрабатывается автором:

- применение различных топологий разбиения поверхности;
- использование нечётких границ между ячейками разбиения.

В ходе реализации предложенного алгоритма удалось добиться практически шестикратного ускорения. Также в ходе экспериментов был выявлен важный факт: время пересылки между процессорами при параллельном моделировании вносит свой постоянный вклад, поэтому уменьшать общее время моделирования можно лишь до определённого предела (см. рис. 2). Уменьшить вклад пересылок можно при помощи изменения топологии разбиения и применения прогнозирования с использованием аппарата нечёткой логики.

Литература

1. Яворский Б.М. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов / Б.М. Яворский, А.А. Детлаф, А.К. Лебедев. – 8-е изд., перераб. и испр. – М.: ООО «Издательство Оникс»: ООО «Издательство Мир и Образование», 2006. – 1056 с.
2. Элементарный учебник физики: Учеб. Пособие. В 3 т. / Под ред. Г.С. Ландсберга: Т. 1. Механика. Теплота. Молекулярная физика. – 13-е изд. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 608 с.
3. Корнеев В.Д. Параллельное программирование в MPI. – 2-е изд., испр. – Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2002. – 215 с.
4. Шпаковский Г.И., Серикова Н.В. Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI / Г.И. Шпаковский, Н.В. Серикова. – Минск: Изд-во БГУ, 2002. – 323 с.
5. Кофман А. Введение в теорию нечётких множеств: Пер. с франц. – М.: Радио и связь, 1982. – 432 с.
6. IBM. Tivoli Workload Scheduler LoadLeveler: Using and Administering. – version 3, release 4. Publication No. SA22-7881-06, 2006. – 718 p.

Иллюстрации

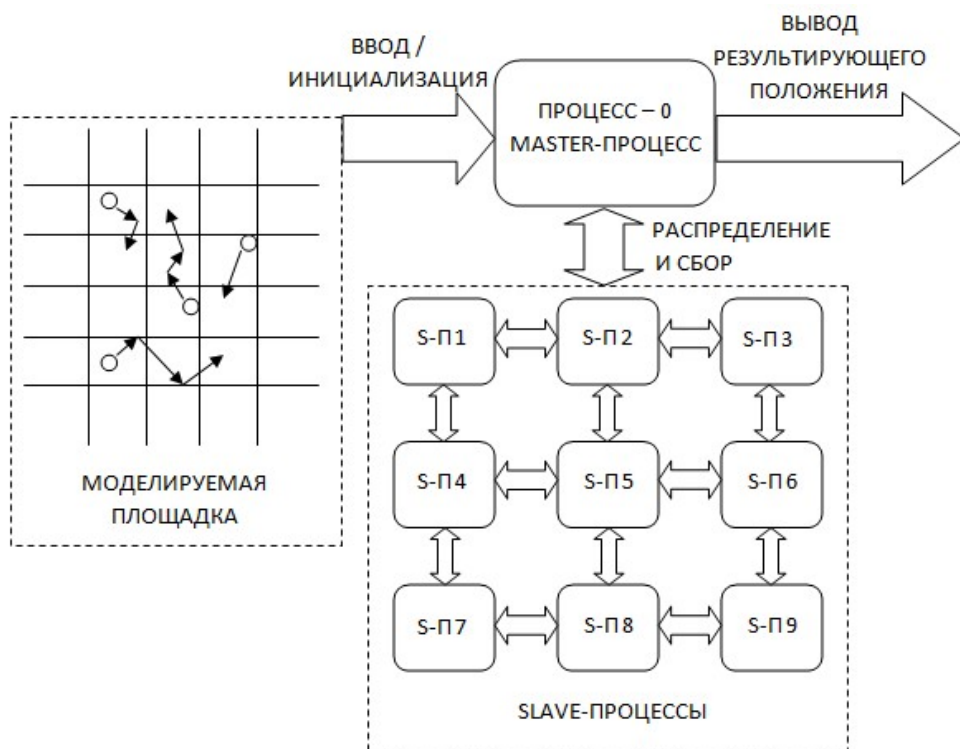


Рис. 1: Параллельная архитектура, используемая в моделирующей программе (для случая 10 процессов, 9 из которых являются slave-процессами)

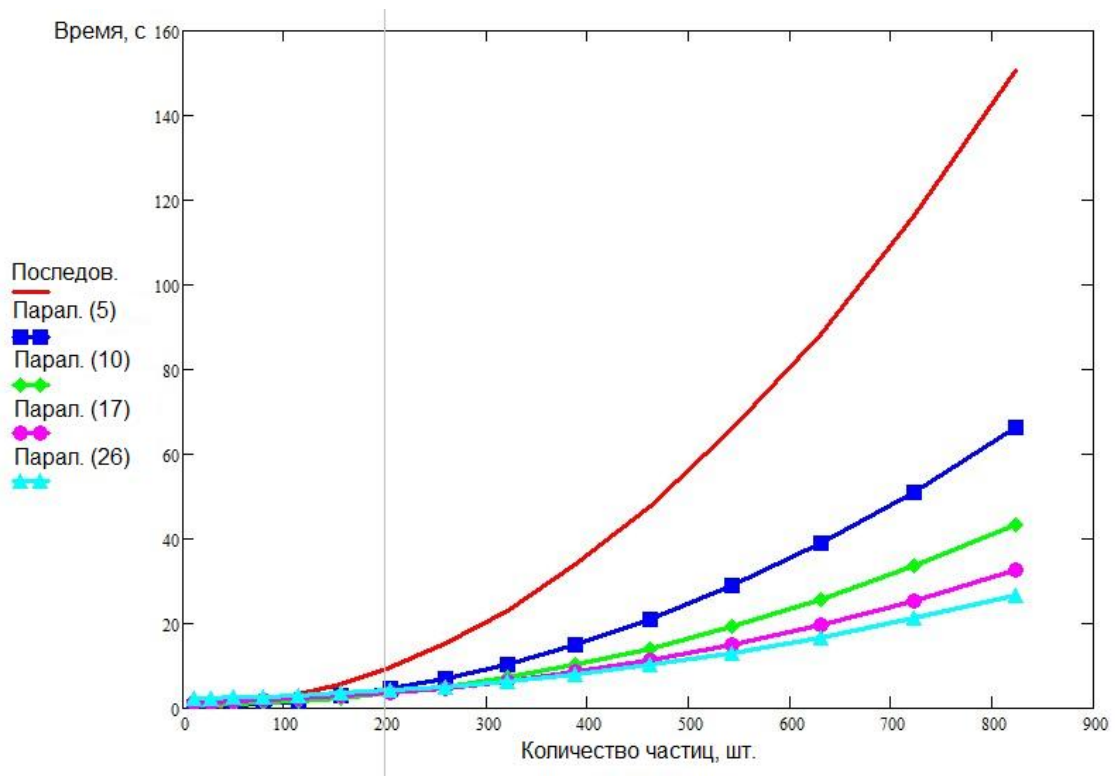


Рис. 2: Время моделирования (среднее по 10 экспериментам)

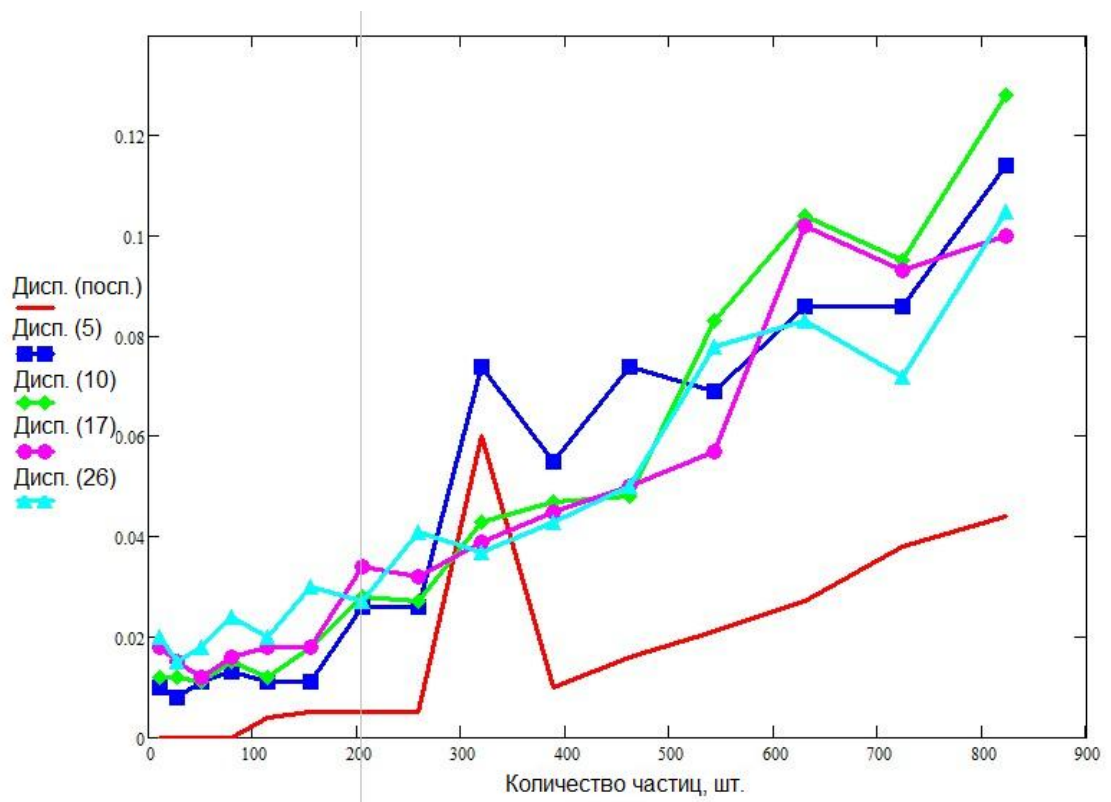


Рис. 3: Дисперсия времени (по 10 экспериментам)

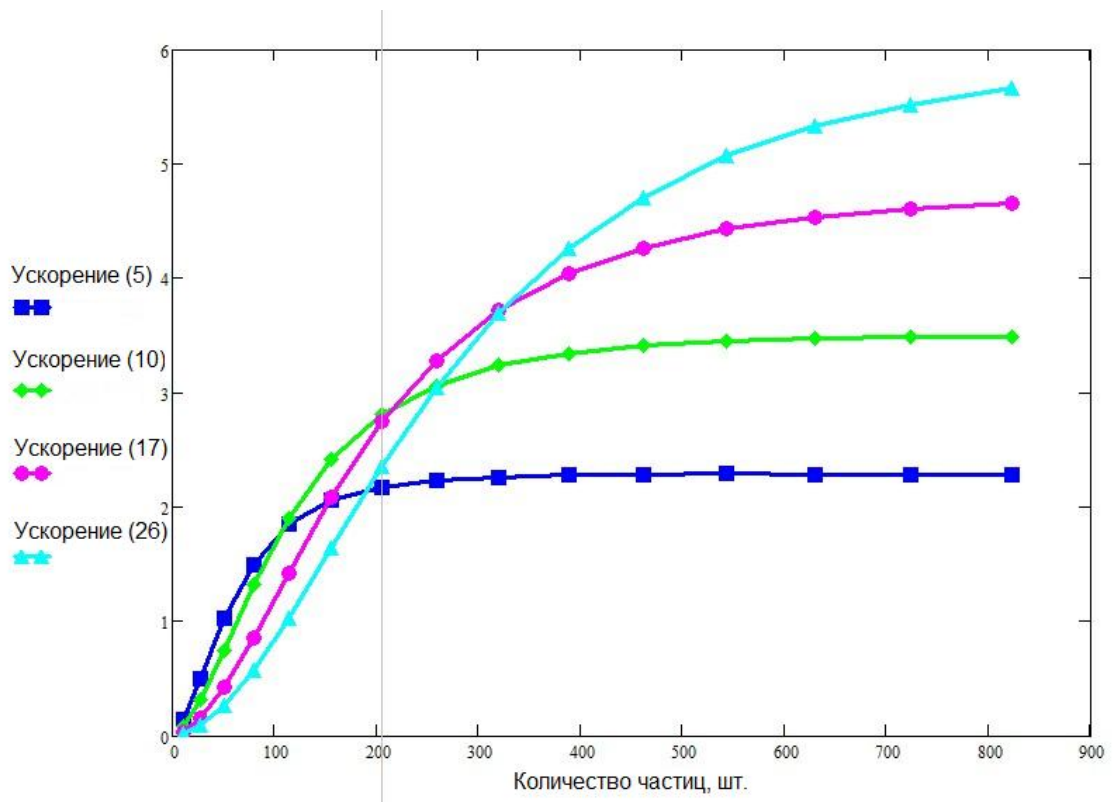


Рис. 4: Ускорение параллельных версий по сравнению с последовательной