

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ ДЛЯ МЕТОДА ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ*

С.Ю. КОРОСТЕЛЁВ
e-mail: sergeyk@ispms.tsc.ru

А.Ю. СМОЛИН
С.Г. ПСАХЬЕ

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Основная цель работы состоит в реализации параллельных вычислений с использованием технологии MPI для метода подвижных клеточных автоматов. Суть работы состоит в определении минимально необходимых точек для синхронизации данных и минимально необходимого объёма таких данных, обеспечивающих корректное выполнение вычислений в параллельном режиме. Следует отметить, что увеличение числа процессоров не всегда приводит к росту значения коэффициента ускорения программы, что в общем случае определяется законом Амдала. Для метода частиц при применении пространственного разбиения критерием эффективности может служить отношение числа частиц, участвующих в обмене с соседними узлами, ко всем частицам на одном процессорном узле. Чем меньше данная величина (R), тем большего ускорения можно достичь при параллельных расчётах. Показано, что разработанные и реализованные алгоритмы, и соответствующие программы параллельных вычислений на распределённых вычислительных системах с использованием технологии MPI для метода подвижных клеточных автоматов позволяют ускорять расчёты с эффективностью ~ 0.5 .

Введение

Механическая эволюция ансамбля подвижных клеточных автоматов (ПКА) определяется решением системы уравнений движения, записанных с учетом многочастичности взаимодействия:

$$\begin{cases} m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i^\Omega + \sum_j \mathbf{F}_{ij} \\ \hat{J}_i \frac{d^2 \boldsymbol{\theta}_i}{dt^2} = \sum_j \mathbf{K}_{ij} \end{cases}, \quad (1)$$

где $\mathbf{r}_i, \boldsymbol{\theta}_i, m_i, \hat{J}_i$ — радиус-вектор, вектор ориентации, масса и момент инерции автомата i , $\mathbf{F}_{ij}$ — парная сила взаимодействия автоматов i и j , $\mathbf{K}_{ij} = q_{ij}(\mathbf{n}_{ij} \times \mathbf{f}_{ij})$ — момент парных сил, q_{ij} — расстояние от центра i -го автомата до точки его контакта с j -м автоматом, единичный вектор $\mathbf{n}_{ij}$ определяется как $\mathbf{n}_{ij} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)/r_{ij}$, r_{ij} — расстояние между центрами автоматов, $\mathbf{F}_i^\Omega$ — эффективная объёмно-зависящая сила, действующая на автомат i и обусловленная взаимодействием его соседей с другими автоматами (многочастичный вклад) [1]. Таким образом существенной особенностью метода является то, что значения сил, действующих в паре автоматов, зависят от взаимодействия каждого

*При финансовой поддержке междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 113.

из автоматов пары с остальными соседями. С точки зрения организации параллельных вычислений это накладывает дополнительные требования к синхронизации данных на узлах распределённой вычислительной системы.

Как показывает профилирование программы основное время расчётов при численном решении системы (1) связано с вычислениями сил и моментов, действующих на автомат. На втором месте по использованию процессорного времени стоит процедура поиска соседей. В силу подвижности автоматов эту процедуру необходимо производить на каждом временном шаге для большинства важных приложений.

Для ускорения вычислений на кластерных (распределённых) вычислительных системах использовалась технология параллельных вычислений MPI (Message Passing Interface — интерфейс пересылки сообщений) [2, 3]. При применении данной технологии необходимо провести декомпозицию исследуемого объекта таким образом, чтобы свести к минимуму обмен данными между вычислительными узлами.

В настоящей работе использовалась пространственная декомпозиция (рис.1), сущность которой состоит в следующем. Весь моделируемый образец разбивался на P пространственных областей (здесь P — число вычислительных узлов) таким образом, чтобы каждая область содержала приблизительно одинаковое число автоматов. При этом соседние области содержали некоторое количество «общих» автоматов, для которых на каждом временном шаге производился обмен данными с использованием технологии MPI. Было определено, что число автоматов, приходящихся на один вычислительный узел, должно быть ~ 10000 или больше, поскольку уменьшение этого числа приводит к увеличению количества «общих» автоматов, что в свою очередь увеличивает количество обменов данными между вычислительными узлами и снижает эффективность параллельных программ.

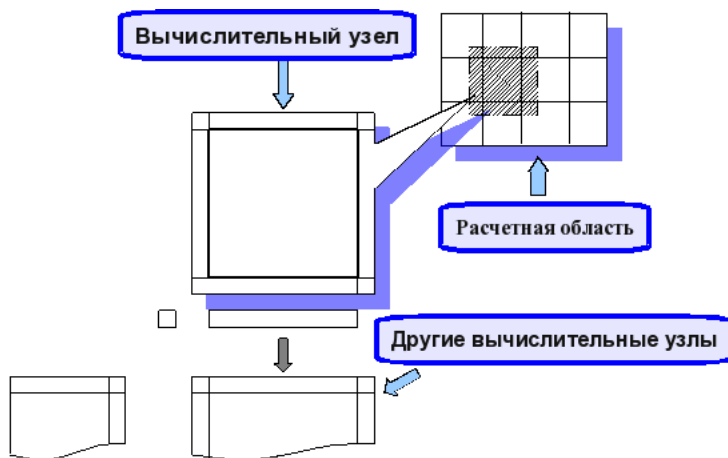


Рис. 1. Схема пространственной декомпозиции образца.

Следует отметить, что увеличение числа процессоров не всегда приводит к росту значения коэффициента ускорения программы, что в общем случае определяется законом Амдала. Для метода частиц при применении пространственного разбиения критерием эффективности может служить отношение числа частиц, участвующих в обмене с соседними узлами, ко всем частицам на одном процессорном узле. Чем меньше данная величина (R), тем большего ускорения можно достичь при параллельных расчётах. В задачах, решаемых методом ПКА, моделируемые объекты часто имеют сложную

геометрическую конфигурацию, что накладывает дополнительные требования на применяемые алгоритмы пространственного разбиения объекта на расчётные области, при этом также необходимо минимизировать величину R для каждого процессорного узла.

В таблице 1 приведены результаты ускорения программы МСА3D, реализующей метод ПКА для трёхмерных задач, при параллельных расчётах для модели связанных мягких сфер (упругое взаимодействие, минимальное число параметров межавтоматных связей). Эти данные показывают достаточно хорошую эффективность разработанной программы.

Т а б л и ц а 1. Эффективность распараллеливания программы МСА3D с использованием технологии MPI.

Количество процессоров N_p	Время выполнения (мс)	Ускорение $S = t_S/t_P$	Эффективность $E = S/N_P$
SMP 4 × 4 AMD Opteron (~23000 автоматов)			
1	$t_S = 1410$	-	-
8	$t_P = 257.4$	5.48	0.68
Суперкластер СКИФ (~360000 автоматов)			
1	$t_S = 21180$	-	-
40	$t_P = 915$	23.15	0.58

Несмотря на достигнутые успехи следует отметить, что усложнение физической модели ПКА будет приводить к увеличению объёма данных, передаваемых для каждого автомата. Следствием этого будет снижение эффективности распараллеливания данной программы. Однако это снижение можно компенсировать уменьшением доли «общих» автоматов. То есть должно существовать оптимальное соотношение общего количества частиц и количества процессорных узлов с точки зрения требуемых вычислительных затрат.

Список литературы

- [1] PSAKHIE S.G., HORIE Y., OSTERMEYER G.P. ET AL. Movable cellular automata method for simulating materials with mesostructure // Theor. and Appl. Frac. Mech. 2001. V. 37, No. 1–3. P. 311–334.
- [2] MPI: THE MESSAGE PASSING INTERFACE. URL: http://parallel.ru/tech/tech_dev/mpi.html (дата обращения 25.02.2011).
- [3] OPEN MPI: Open Source High Performance Computing. URL: <http://www.open-mpi.org> (дата обращения 25.02.2011).