УДК 681.3.012:621.1

БАГАТОПРОЦЕСОРНІ ТЕХНОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ ЗАДАЧ МОНТЕ – КАРЛО

Г. Г. Швачич
Доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри
Кафедра прикладної математики та обчислювальної техніки
Національна металургійна академія України
пр. Гагаріна, 4, м. Дніпропетровськ, Україна, 40005
E-mail: sgg1@ukr.net

У роботі розглядаються кластерні технології моделювання задач Монте – Карло. Показано, що лише застосування сучасних суперпродуктивних систем дозволило по-новому реалізувати механізм відповідних розподілених обчислень. Приводяться схеми обчислень, які забезпечують збільшення продуктивності і швидкодії. Ефективність запропонованого підходу ілюструється порівняльним аналізом розв'язку деякого класу задач

Ключові слова: обчислювальний кластер, алгоритми паралельних обчислень, метод Монте – Карло, локальна оптимізація

В работе рассматриваются кластерные технологии моделирования задач Монте – Карло. Показано, что только применение современных суперпроизводительных систем позволило по-новому реализовать механизм соответствующих распределенных вычислений. Приводятся схемы вычислений, которые обеспечивают повышение производительности и быстродействия. Эффективность предложенного подхода иллюстрируется сравнительным анализом решения некоторого класса задач

Ключевые слова: вычислительный кластер, алгоритмы параллельных вычислений, метод Монте – Карло, локальная оптимизация

1. Вступ

Серед різноманіття числових методів у математичних розрахунках останнім часом можна говорити про відродження таких методів, як методи Монте – Карло [1, 2]. Ця назва об'єднує групу числових методів, основаних на одержанні великого числа реалізацій стохастичного процесу, який формується таким чином, щоб його ймовірнісні характеристики збігалися з аналогічними величинами розв'язуваної задачі. Методи Монте – Карло використовуються для розв'язування задач у галузях фізики, математики, економіки, оптимізації, теорії керування та ін. Вітчизняні праці про методи Монте – Карло з'явились у 1955 – 1956 роках. З того часу написано багато наукових праць, що описують застосування цього методу [3 – 5]. Навіть поверховий перегляд назв робіт дозволяє зробити висновок про застосовуваність методу Монте – Карло для розв'язку прикладних задач у багатьох галузях науки і техніки.

Відмітною рисою методів Монте – Карло вважається їх експериментальний характер. Для певності будемо називати методом Монте – Карло процедуру, що включає використання прийомів статистичної вибірки для наближеного розв'язку тієї чи іншої математичної або фізичної задачі. Методи Монте – Карло суттєво впливали і впливають на розвиток методів обчислювальної математики, а при розв'язку певного класу задач успішно поєднуються з іншими обчислювальними методами і доповнюють їх. Їх застосування виправдане, в першу чергу, до тих задач, які допускають теоретико-ймовірнісний опис. Це пояснюється як природністю одержання відповіді з певною заданою ймовірністю в задачах, що мають імовірнісний зміст, так і суттєвим спрощенням процедури розв'язку. У даний час існують статистичні методи розв'язування для деяких класів диференціальних рівнянь у частинних похідних, інтегральних рівнянь, задач про власні значення і системи лінійних алгебраїчних рівнянь.

2. Цілі і задачі досліджень

Завдання, на вирішення якого спрямовано представлене дослідження, полягає у розробці та дослідженні деяких аспектів багатопроцесорних технологій моделювання задач Монте – Карло. Повільна збіжність методу є його істотним недоліком, проте в даній статті необхідно розробити його розподілені обчислювальні модифікації, які забезпечують високий порядок паралельних обчислень. Практичну ілюстрацію механізму роботи розробленого підходу і деякі принципові особливості його реалізації необхідно розглянути на прикладі розв'язку крайових задач і задач з початковими умовами для лінійних диференціальних рівнянь. Це пояснюється тим, що зазначений клас задач є однією із цікавих і перспективних областей додатків методу Монте – Карло. Показати, що розроблені алгоритми стійкі для будь-яких вхідних даних, мають максимальну паралельну форму, і, отже, мінімальний можливий час реалізації на паралельних обчислювальних системах.

3. Модифікований алгоритм паралельних обчислень

Застосування паралельних обчислювальних систем (ПОС) є стратегічним напрямом розвитку обчислювальної техніки. Ця обставина викликана не тільки принциповим обмеженням максимально можливої швидкодії звичайних послідовних ЕОМ, але і практично постійним існуванням обчислювальних задач, для вирішення яких можливостей існуючих засобів обчислювальної техніки завжди виявляється недостатньо. До таких задач відносяться, наприклад, чисельне моделювання процесів гідродинаміки і металургійної теплофізики [6, 7], задачі розпізнавання образів, оптимізаційні задачі з великим числом параметрів, моделювання клімату, генна інженерія, проектування інтегральних схем, аналіз забруднення навколишнього середовища [8], рішення широкого кола багатовимірних нестаціонарних задач [9] і т.д. Останнім часом розвиток суперпродуктивних обчислювальних систем визначається застосуванням багатопроцесорних обчислювальних систем. Обчислювальні експерименти, які наводяться в даній роботі, виконувались за допомогою багатопроцесорної обчислювальної системи [10].

Особливості реалізації паралельних обчислень методом Монте – Карло. Зауважимо, що за допомогою методу Монте - Карло можна безпосередньо знайти наближений розв'язок задачі в єдиній фіксованій точці, не знаючи розв'язку задачі для основних точок сіткової області. Цією обставиною метод Монте - Карло, наприклад, у застосуванні до задачі Діріхле, різко відрізняється від звичайних стандартних способів розв'язку. На рис. 1 подано модифікований алгоритм паралельних обчислень методом Монте – Карло. Тут кожен обчислювач має власний генератор випадкових чисел. Це дозволяє уникнути неодмінної присутності між генератором випадкових чисел і "обчислювачем" маршрутизатора-комунікатора. Очевидно, що таке рішення дозволяє прискорити процес обчислень. Виграш у продуктивності можна оцінити експериментальним шляхом.

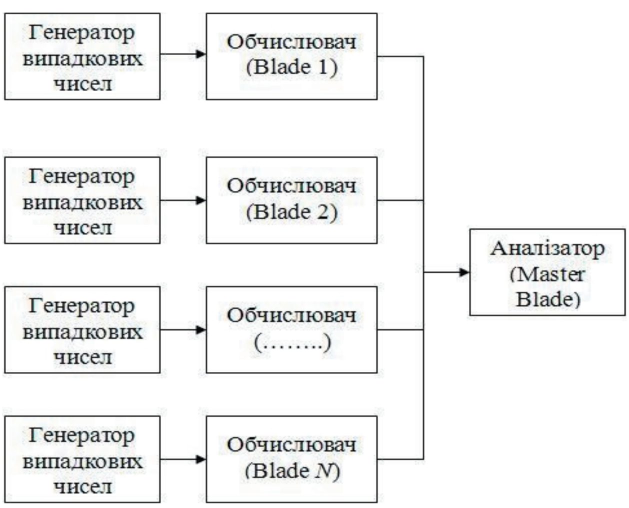

Рис. 1. Модифікований алгоритм паралельних обчислень методом Монте — Карло

Таким чином, запропоновані розподілені алгоритми Монте – Карло є стійкими по відношенню до будь-яких вхідних даних, мають максимальну паралельну форму і, отже, мінімальний можливий час реалізації на паралельних обчислювальних пристроях. Якщо можна призначити один процесор на один вузол розрахунку, то стає можливим проведення розрахунків у всіх вузлах сіткової області паралельно й одночасно.

4. Аналіз проблеми блукань і розв'язування крайових задач

Крайові задачі й задачі з початковими умовами для лінійних диференціальних рівнянь є однією з найцікавіших сфер застосування методу Монте – Карло. Зв'язок між цими задачами був відомий давно [3 – 5]. Проте можливість застосування цього зв'язку для фактичного відшукання результатів з'явилася тільки завдяки розвитку обчислювальних машин. Застосування цього методу дає можливість по-новому сприйняти ідею розпаралелювання обчислень і застосування кластерних технологій обчислення. Щоб пояснити основну ідею методу, розглянемо задачу Діріхле для рівняння Лапласа. Нехай маємо певну однозв'язну область G, на межі якої задано функцію $f(Q)$. Потрібно знайти таку функцію $U(P)$, яка всередині даної області G задовольняє рівняння Лапласа, тобто:

$$\Delta U = 0\,, \tag{1}$$

а на межі області P набуває таких заданих значень:

$$U_{|\Gamma} = f(Q)\,. \tag{2}$$

Зазвичай цю задачу зводять до певної кінцево-різницевої схеми. Область G вкривається вузлами квадратної сітки. У внутрішніх вузлах шукають значення функції $U(P)$, виходячи з такої системи рівнянь:

$$U(P) = \frac{1}{4}[U(P_1) + U(P_2) + U(P_3) + U(P_4)]\,. \tag{3}$$

Тут символами $\{P_{1,}\, P_2, P_3, P_4\}$ позначають чотири вузли, сусідні з внутрішнім вузлом P, вони лежать в області G або на її межі.

Розглянемо пов'язану з цією системою теоретико-ймовірнісну схему. Уявімо собі частинку, яка змушена пересуватися по вузлах сітки з такими цілочисловими координатами (i, j) на площині:

$$\left.\begin{array}{l} x_i = x_0 + i\,\eta,\ y_j = y_o + j\eta \\ (i, j = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots,) \end{array}\right\},$$

при цьому

$$\Delta x_i = x_{i+1} - x_i,\ \Delta y_j = y_{j+1} - y_j.$$

Припустимо, що сітка S_η складається з внутрішніх і граничних вузлів, у яких задано граничні умови першого роду. Граничні вузли являють собою сукупність лінійних точок $M_{pq}\left(x_p, y_q\right)$, яка апроксимує криволінійну межу Γ області G з точністю до η. Частинка M здійснює рівномірне випадкове блукання серед вузлів сітки (3). Зокрема, перебуваючи у внутрішньому вузлі $M_{i0,j0}$ сітки S_η, ця частинка за один перехід, з однією і тією самою ймовірністю, яка дорівною $1/4$, може переміститися в один з сусідніх вузлів, зокрема, або в $M_{i-1,j}(x_{i-\eta},y_j)$, це буде крок уліво, або в $M_{i+1,j}(x_{i+\eta},y_j)$ – крок управо, або в $M_{i,j-1}(x_i,y_{j-\eta})$ – крок униз, або $M_{i,j+1}(x_i,y_{j+\eta})$ – крок угору. Причому, кожен такий одиничний перехід є абсолютно випадковим і не залежить від положення частинки та її попередніх переміщень (історії блукань). Вважатимемо, що блукання частинки M закінчується, як тільки вона потрапляє на межу Γ_η; в цьому випадку межа Γ_η є "поглинальним екраном". Можна довести [5], що блукання точки M через скінченне число кроків закінчується саме на цій межі.

Якщо частинка M почала своє блукання з фіксованої внутрішньої точки $M_{i0,j0}$ на сітці S_η, то скінченну сукупність її послідовних положень можна записати таким чином:

$$M_{i0,j0,}M_{i1,j1},\ \ldots,\ M_{iS,jS}\ ,$$

причому

$$M_{i_k j_k} \in \Gamma\eta\,(k=0,1,\ldots,S-1)\,.$$

Тут вираз $M_{i_k j_k} \in \Gamma\eta$ відображає траєкторію частинки (з кількістю кроків S), яку прийнято називати історією блукання.

Рівномірне випадкове блукання частинки можна організувати за допомогою рівномірно розподіленої послідовності однорозрядних випадкових чисел [5, 7 – 10], що набувають таких значень:

0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9.

Для цього, наприклад, досить проводити розіграш, тобто випадкову вибірку з чисел $\{0\ -\ 9\}$, дотримуючись інструкції, поданої в табл. 1.

Таблиця 1

Визначення кроку частинки залежно від випадкового числа

Випадкове число	Характер переміщення
0 або 4	$\Delta x_i = \eta$ (крок управо)
1 або 5	$\Delta Y_Y = \eta$ (крок угору)
2 або 6	$\Delta\Delta x_i = -\eta$ (крок уліво)
3 або 7	$\Delta\Delta Y_Y = -\eta$ (крок униз)

Випадкові числа беруться з готових таблиць або визначаються генератором псевдовипадкових чисел [3]. Останній спосіб набув широкого застосування під час використання багатопроцесорних обчислювальних систем, оскільки він не дозволяє занадто завантажувати пам'ять системи. Частинка, що почала своє випадкове блукання з внутрішнього вузла $M_{i0,j0}$, після першого кроку з імовірністю, яка дорівнює $1\!\big/\!_4$, потрапляє в один з чотирьох сусідніх вузлів, а саме:

I. $M_{i,j},M_{i-1,j},\ \ldots\ ,\ ;$

II. $M_{i,j},M_{i+1,j},\ \ldots\ ,\ ;$

III. $M_{i,j},\ M_{i,j-1},\ \ldots\ ,\ ;$

IV. $M_{i,j},M_{i,j+1},\ \ldots\ .$

За формулою повної ймовірності встановлюємо, що:

$$P(i,j,p,q)=\frac{1}{4}P(i\text{-}1,j,p,q)+\frac{1}{4}P(i+1,j,p,q)+ \\ +\frac{1}{4}P(i,j\text{-}1,p,q)+\frac{1}{4}P(i,j+1,p,q). \tag{4}$$

Звідси, перемножуючи обидві частини рівності (4) на граничні значення γ_{pq} і підсумовуючи за всіма можливими значеннями p і q, одержимо, що

$$\vartheta_{ij}=\frac{1}{4}(\vartheta_{i\text{-}1,j}+\vartheta_{i+1,j}+\vartheta_{i,j\text{-}1}+\vartheta_{i,j+1})\,. \tag{5}$$

Величини ϑ_{ij} допускають експериментальне визначення, для цього треба замінити математичне очікування ϑ_{ij} емпіричним математичним очікуванням, тоді відповідний вираз набуде такого вигляду:

$$U_{ij}=\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{w}\phi(x_p^{(k)}y_q^{(k)})\,. \tag{6}$$

Формула (6) дає статистичну оцінку величини $U_{i,j}$ і може бути застосована до наближеного розв'язку задачі Діріхле. Проілюструємо розроблений алгоритм, розв'язуючи конкретні приклади.

5. Обчислювальні експерименти

Обчислювальні експерименти виконувалися на основі застосування багатопроцесорної обчислювальної системи [10]. При цьому методика відповідних розрахунків проводилася з урахуванням розробленого підходу. Розглянемо характерні приклади обчислень.

Приклад. Методом Монте - Карло знайти величину U(2,2), якщо

$$\Delta U(x,y)=0,\ \text{ в області } G\{0\ \le x\le\ 4;\ 0\ \le y\le\ 4\}, \tag{7}$$

а

$$\left.\begin{aligned} &U(x,0)=0,\ \ 0\le x\le 4;\\ &U(4,y)=y,\ \ 0\le y\le 4;\\ &U(x,4)=x,\ \ 0\le x\le 4;\\ &U(0,y)=0,\ \ 0\le y\le 4.\end{aligned}\right\}. \tag{8}$$

Розв'язок. Для квадрата G з межею Г побудуємо квадратну сітку S, в якій крок $\eta=1$. Далі розглядаємо серію рівномірних блукань частинки серед вузлів сітки S_η, виходячи з початкового положення (2,2). Блукання закінчуються на межі Г, у граничних вузлах сітки G_k, заданих умовами (8). Переміщення частинки відбувалося відповідно до описаної вище інструкції, причому появу випадкових чисел 8 і 9 вважаємо стоянням частинки на місці.

На підставі формули (6) можемо встановити, що:

$$U(2,2)=\frac{1}{20}\sum_{k}\varphi(x_p^{(k)}y_q^{(k)})=\frac{1}{20}\cdot 20=1 .$$

Зауважимо, що в даному випадку відомий точний розв'язок задачі Діріхле (7), (8), а саме:

$$U(x,y)=\frac{xy}{4} .$$

Тому

$$U(2,2)=\frac{2\cdot 2}{4}=1 .$$

Таким чином, за допомогою методу статистичних випробувань одержали точне значення величини U(2,2). Аналогічно визначаються і решта значень шуканих функцій заданої області.

6. Висновки

У наведеній статті набув подальшого розвитку процес математичного моделювання прикладних задач на основі використання багатопроцесорної обчислювальної системи. Досвід експлуатації перших паралельних систем показав, що для їх ефективної роботи потрібно радикально змінювати структуру числових методів. У зв'язку з цим розроблено відповідні розподілені алгоритми, виявлено і показано особливості моделювання прикладних задач на основі застосування багатопроцесорних систем.

Останнім часом можна говорити про відродження методу Монте – Карло. Це пояснюється тим, що цей метод ідеально підходить до застосування багатопроцесорної обчислювальної системи. Причому, чим більше процесорів буде в кластері, тим ефективніше буде розв'язуватися саме та задача, яка розглядується в даній роботі.

Повільна збіжність методу є його недоліком. Проте в проведених дослідженнях показано, що формування вибіркових випадкових чисел стосовно окремих груп дозволяє істотно підвищити точність методу. Крім того, показано, що метод Монте – Карло досить вдало пристосований до розв'язування багатовимірних задач. Наприклад, застосовуючи звичайний метод розв'язку систем лінійних алгебраїчних рівнянь для обчислення одного невідомого, треба визначити також і решту. У даному способі цього робити не потрібно, кожного разу визначається тільки одна необхідна координата розв'язуваної системи.

Застосування розробленого підходу дає можливість по-новому подивитись на ідею розпаралелювання обчислень та використання кластерних технологій обчислення. У статті запропоновано модифікований алгоритм паралельних обчислень за методом Монте – Карло. Тут кожен обчислювач має власний генератор випадкових чисел. При цьому проміжні розрахунки здійснюються незалежно на різних, окремо взятих лезах кластера – "обчислювачах", а результати вже обробляються на якомусь окремо взятому master-лезі – "аналізаторі". Ця обставина дозволяє позбутися неодмінної присутності маршрутизатора-комунікатора між генератором випадкових чисел та "обчислювачем". Очевидно, що таке рішення дозволяє прискорити процес обчислень.

Література

1. Михайлов, Г. А. Численное статистическое моделирование. Методы Монте - Карло [Текст] / Г. А. Михайлов, А. В. Войтишек. – М.: Академия, 2006. – 368 с.
2. Михайлов, Г. А. Оптимизация весовых методов Монте - Карло по вспомогательным переменным [Текст] / Г. А. Михайлов, И. Н. Медведев // Сиб. матем. журн. – 2004. – № 45. – С. 399 – 409.
3. Єрмаков, С. М. Метод Монте - Карло и смежные вопросы / С. М. Ермаков. – М.: Наука, 1971. – 471 с.
4. Соболь И. М. Метод Монте - Карло / И. М. Соболь. – М.: Наука, 1968. – 64 с.
5. Браун, Дж. Методы Монте - Карло [Текст] / Дж. Браун // Современная математика для инженеров; под ред. Э. Ф. Беккенбаха. – М.: Изд-во ин. лит., 1958. – 500 с.
6. Коздоба, Л. А. Вычислительная теплофизика [Текст] / Л. А. Коздоба. – К.: Наук. думка, 1992. – 224 с.
7. Швачич, Г. Г. Математическое моделирование одного класса задач металлургической теплофизики на основе многопроцессорных параллельных вычислительных систем [Текст] / Г. Г. Швачич // Математичне моделювання. – 2008. – № 1 (18). – С. 60 – 65.
8. Швачич, Г. Г. К вопросу конструирования параллельных вычислений при моделировании задач идентификации параметров окружающей среды [Текст] / Г. Г. Швачич // Математичне моделювання. – 2006. – № 2 (14). – С. 23 – 34.
9. Швачич, Г. Г. ППП исследования решений некоторого класса задач нестационарной теплопроводности [Текст]/ Г. Г. Швачич, А. А. Шмукин, Д. В. Протопопов // Металлургическая теплотехника: Сб. науч. трудов НМетАУ в 2-х кн. – Кн. 2. – Днепропетровск: Пороги, 2005. – С. 448 – 453.
10. Башков, Є. О. Високопродуктивна багатопроцесорна система на базі персонального обчислювального кластера [Текст] / Є. О. Башков, В. П. Іващенко, Г. Г. Швачич // Наук. пр. Донецького національного технічного університету. Серія "Проблеми моделювання та автоматизації проектування". – Вип. 9 (179). – Донецьк : ДонНТУ, 2011. – С. 312 – 324.