

# Моделирование процессов газофазной конденсации металлических наночастиц на вычислительном кластере “СКИФ Урал”\*

Д.В. Терзи

В работе рассматривается подход организации программного комплекса моделирования процессов формирования металлических наночастиц методом газофазной конденсации на кластерных суперкомпьютерных системах. Программная реализация задачи осуществлена на языке Фортран с использованием библиотеки MPI. Последовательным образом приведено описание примененных методов и алгоритмов, направленных на повышение эффективности применения параллельных технологий в приложении. При проведении вычислительных экспериментов использовалось до 201 процессорных ядер кластера “СКИФ Урал”, при этом получена эффективность распараллеливания, составляющая не менее 65%. В заключение намечены дальнейшие шаги по развитию работы.

## 1. Введение

Рассматриваемый в работе метод производства нанодисперсных металлических порошков заключается в переводе расплавленного металла в газовую фазу, с последующей организацией процесса конденсации металлического пара в атмосфере холодного инертного газа. Для прогнозирования характеристик производимого нанодисперсного порошка в зависимости от параметров технологического цикла необходимо численное моделирование протекающих процессов в камере реактора, которое должно учитывать многомасштабность рассматриваемых явлений, привлекая методы молекулярной и газофазной динамики. Сложность явлений, необходимость работы с наноразмерными частицами определяют высокую ресурсоемкой рассматриваемой задачи, а, следовательно, и востребованность ее решения на супер-ЭВМ.

Основная задача работы заключается в разработке методов и алгоритмов моделирования газофазной конденсации металлических наночастиц под кластерные вычислительные системы. В качестве исходных данных исследования принимается существующая математическая модель протекающих производственных процессов формирования металлических нанодисперсных порошков [1]. Предложен метод решения поставленной задачи на основе реализации параллелизма по схеме «мастер-рабочие».

## 2. Математическая модель

В работе рассматривается математическая модель процессов образования наночастиц конденсацией из газовой фазы, предложенная в [1].

Схема формирования металлических наночастиц конденсацией из газовой фазы выглядит следующим образом: в камеру с охлаждаемыми стенками накачивается инертный газ, вблизи дна камеры помещается нагреваемый сосуд с кипящим жидким металлом, который служит источником атомов металла – мономеров. Испаряясь с поверхности жидкости, металлический пар распространяется в объеме камеры, где, по мере его охлаждения, могут создаваться высокие степени пресыщения, являющиеся необходимыми условиями нуклеации.

Рассматривая газопаровые потоки, математическая модель явления представляет собой систему дифференциальных уравнений в частных производных. Система включает в себя уравнения сохранения количества движения для газовой смеси, массы, уравнения теплопроводности и диффузии.

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 10-07-96001-р\_урал\_а).

Уравнение Навье-Стокса	{	$\frac{\partial \rho V}{\partial t} + \nabla(\rho V \otimes V) = -\nabla P + \nabla(\eta(\nabla V + \nabla V^T)) + \rho g$
Уравнение неразрывности		$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho V) = 0$
Уравнение теплопроводности		$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla(\rho VT) = \nabla(k \nabla T)$
Уравнение состояния		$P = \frac{\rho RT}{M}$
Уравнения конвективной диффузии для аргона и мономеров металла		$\frac{\partial \rho C_{Ar}}{\partial t} + \nabla(\rho V C_{Ar}) = \nabla(D_{Ar-M_1} \nabla C_{Ar})$
Уравнение конвективной диффузии для кластеров		$\frac{\partial \rho C_{M_1}}{\partial t} + \nabla(\rho V C_{M_1}) = \nabla(D_{Ar-M_1} \nabla C_{M_1})$
		$\frac{\partial \rho C_{M_k}}{\partial t} + \nabla(\rho V C_{M_k}) = -\nabla(J_{M_k-Ar-M_1}) + R_{M_k}$

В основе метода решения данной системы дифференциальных уравнений с граничными и начальными условиями лежит схема переменных направлений. При этом камера разбивается на ячейки, которые в предположении осевой симметрии представляют собой цилиндры (при условии нахождения на оси камеры) или цилиндрические слои. Решение систем разностных уравнений производится методом прогонки [2].

Для математического описания микропроцессов используется модель Сцилларда, согласно которой пар состоит из смеси мономеров и кластеров, содержащих различное количество молекул. Кластеры способны расти, присоединяя мономеров или другие кластеры, а также распадаться на кластеры меньшего размера или отделять мономер. Общее уравнение динамики процесса выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} = \sum_{k=1}^{n-1} \beta_{n-k,k} f_{n-k} f_k - \sum_{k=1}^{\infty} \beta_{n,k} f_n f_k + \sum_{k=n+1}^{\infty} \alpha_{k-n,n} f_{k-n} f_n - \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_{n-k,k} f_{n-k} f_k$$

Здесь  $f_n$  – концентрация кластеров, состоящего из  $n$  атомов, первое слагаемое описывает количество кластеров размера  $n$ , которые образуются в единицу времени из кластеров размером  $n-k$  и  $k$ , второе описывает частоту объединения кластеров размером  $n$  и  $k$ , третье равно частоте распада кластера размером  $k$  на составляющие размерами  $k-n$  и  $n$ , последнее – частоте распада кластера размером  $n$  на составляющие, содержащие  $n-k$  и  $k$  мономеров. Таким образом, коэффициенты уравнений  $\alpha$  и  $\beta$  пропорциональны соответственно вероятностям распада и слияния кластеров.

Ввиду чрезмерной вычислительной сложности работы с данным уравнением и по ряду других соображений, в модели принимаются ряд допущений и упрощений [1]. Так, кластеры группируются логарифмическим образом по возрастанию их размеров.

### 3. Алгоритмическая сложность

В рассмотренной математической модели выделим следующие функционально-логические блоки моделирования: кластеризация (процессы коагуляции, распада, присоединения мономеров), диффузия кластеров, диффузионные потоки аргона и металлических мономеров (рис. 1). Рассмотрим алгоритмическую сложность выделенных фрагментов моделирования.

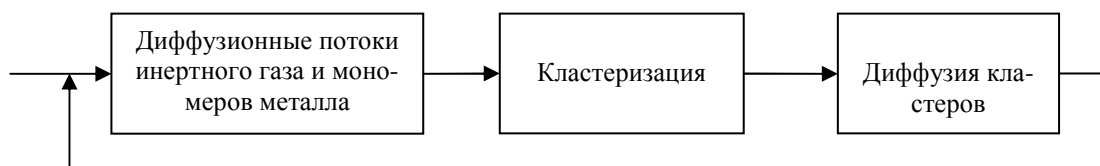


Рис. 1. Схема моделирования

Пусть  $N \times M$  – размерность (число ячеек) осевого сечения камеры реактора,  $L_M$  и  $L_m$  – соответственно число шагов макро- и микро моделирования,  $K$  – размерность логарифмической линейки распределения количества кластеров по размерам. Согласно рассматриваемой модели:  $O(L_M \cdot N \cdot M \cdot L_m \cdot K)$  – алгоритмическая сложность моделирования процессов кластеризации,  $O(L_M \cdot N \cdot M \cdot K)$  – процессов диффузии кластеров,  $O(L_M \cdot N \cdot M)$  – остальное (с большой константой). Таким образом, при реализации программного комплекса моделирования рассматриваемых процессов под вычислительные системы кластерного типа предпочтения по применению технологий параллелизма были отданы моделированию процессов кластеризации и диффузии кластеров, учитывая их высокую вычислительную ресурсоемкость.

#### 4. Решение поставленной задачи

Реализация программного комплекса моделирования процессов газофазной конденсации металлических наночастиц проводилась на языке Фортран, поддержка параллелизма осуществлена при помощи библиотеки MPI. Рассмотрим последовательно примененные методы, направленные на улучшение эффективности применения параллелизма. Совокупность реализованных методов до  $i$ -го этапа включительно назовем как Алгоритм  $i$ .

На рис. 2 и рис. 3 представлены соответственно характеристики ускорения и эффективности реализованных алгоритмов, рассчитанные для 100 итерационных шагов моделирования.

Используемые формулы:  $E_p = \frac{t_1}{p \cdot t_p} \cdot 100\%$  – эффективность распараллеливания,  $S_p = \frac{t_1}{t_p}$  –

ускорение; где  $t_1$  – время расчета на одном ядре используемого суперкомпьютера (последовательная версия),  $t_p$  – время счёта по схеме «мастер-рабочие» на  $p + 1$  ядрах ( $p$  рабочих и один мастер). В настоящей работе все приведенные результаты (эффективность, ускорение, непосредственные данные моделирования) получены на вычислительном кластере «СКИФ Урал»[3] при обычной его загрузке.

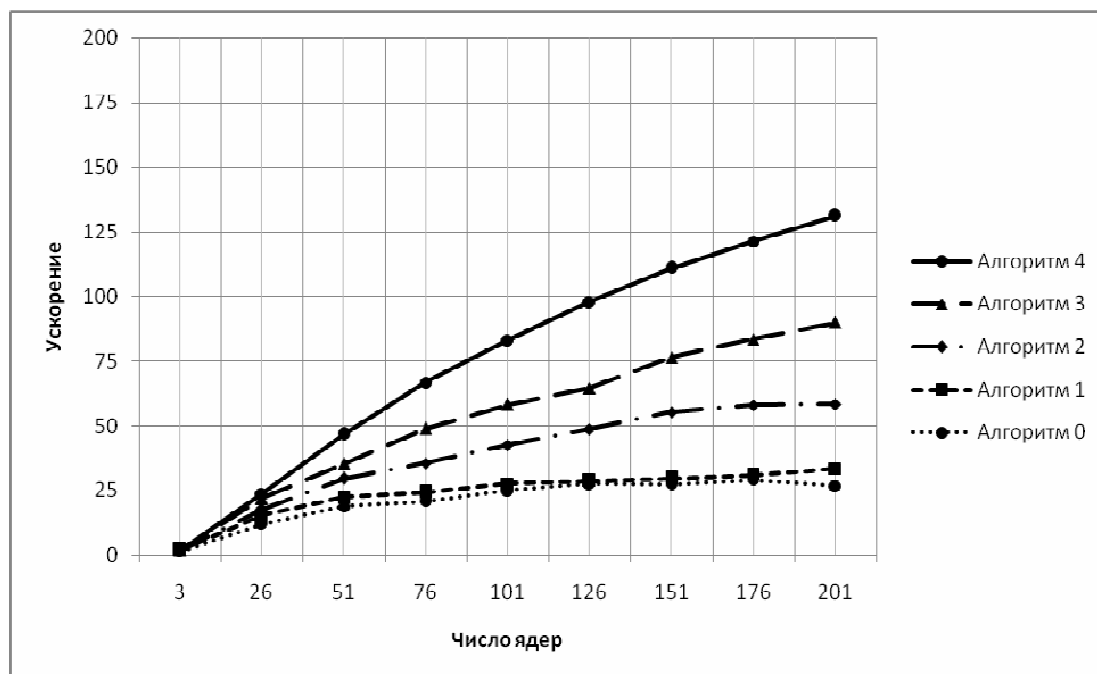


Рис. 2. Графики ускорения последовательно реализованных алгоритмов

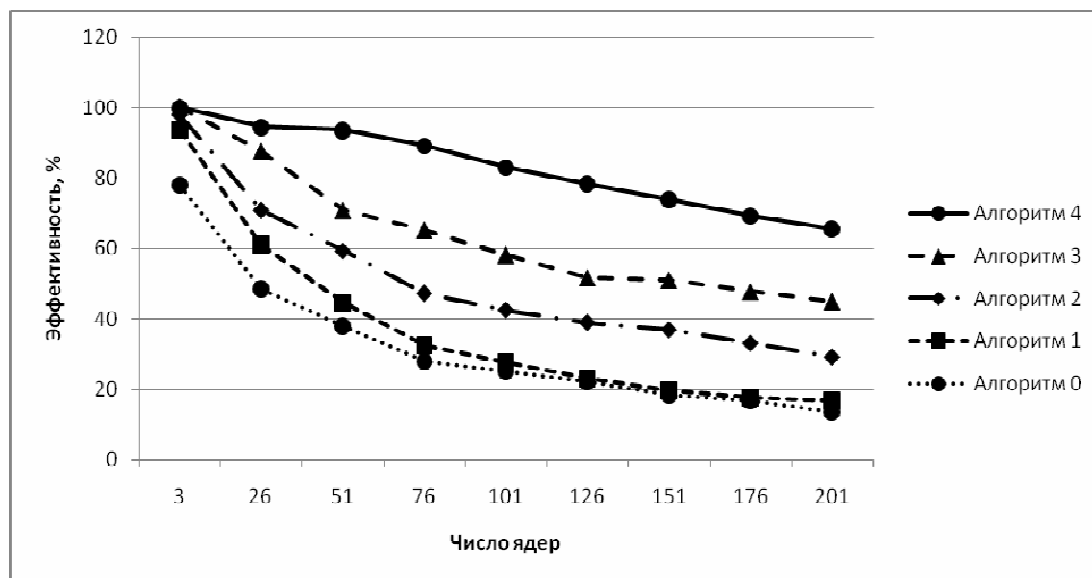


Рис. 3. Графики эффективности параллелизма последовательно реализованных алгоритмов

**Алгоритм 0.** Исходя из оценок алгоритмических сложностей составляющих этапов моделирования была выбрана схема «мастер-работчие» для реализации параллельного программного комплекса моделирования. На каждом шаге моделирования парогазовых потоков мастер делегирует рабочим выполнение логики кластеризации. Сам мастер вычисляет все остальные этапы моделирования. В модели принимается допущение, что процессы кластеризации происходят в каждой ячейке независимо от других ячеек (на каждом макро-шаге моделирования диффундирующие факторы учитываются после выполнения логики кластеризации). Рабочим распределяется одинаковое число ячеек камеры.

**Алгоритм 1.** Невысокий коэффициент эффективности распараллеливания при 3-х использованных ядрах говорит о неравномерной загрузке рабочих. Действительно, в ячейках камеры реактора могут происходить процессы кластеризации различной ресурсоемкости вычислений. Профилирование работы программы показало, что загруженность отдельных рабочих может различаться в 2-3 раза. Был применен метод балансировки загрузки рабочих, основанный на использовании статистических результатов загруженности ядер на предыдущем шаге. Все ячейки камеры группируются в последовательные (в плане расположения в памяти) блоки. Зная время, необходимое для обработки определенного блока, можно оптимальным способом с требуемой точностью распределить последовательным образом блоки ячеек по рабочим. Под оптимальностью здесь понимается равномерная загрузка процессорных ядер. Время берется оценочное – временные затраты на обработку блока на предыдущем шаге моделирования. Требование к распределению блоков последовательным образом основано на стремлении снизить количество инициализаций передач данных для повышения быстродействия передач данных.

Таким образом, задача по балансировке может быть сформулирована следующим образом: есть последовательный набор количественных характеристик  $x_i$  ( $1 \leq i \leq n$ ), необходимо разбить этот набор на  $m$  ( $m \leq n$ ) последовательных частей  $C_j$  ( $1 \leq j \leq m$ ), так, чтобы выполнялось условие:

$$\max_{1 \leq j \leq m} \left( \sum_{x \in C_j} x \right) \rightarrow \min \quad (1)$$

Пусть в качестве рассматриваемых количественных характеристик выступают натуральные числа (что, в сущности, не меняет общности). Тогда справедливо следующее утверждение.

*Утверждение.* Существует алгоритм решения задачи (1) за время  $O(n \cdot \log_2(\sum_{i=1}^n x_i))$ .

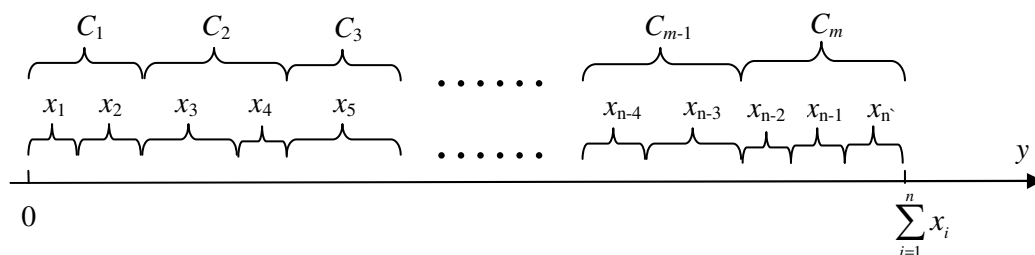


Рис. 4. Иллюстрация к доказательству

*Доказательство утверждения.* Результирующий алгоритм является объединением алгоритма золотого сечения с “жадным” алгоритмом. Бинарным поиском на отрезке  $Y = [0, \sum_{x \in X} x]$  находится минимальное  $y^* \in Y$ , при котором возможно распределение  $x_i (1 \leq i \leq n)$  на  $m$  последовательных частей. Распределение при заданном  $y' \in Y$  осуществляется эвристическим методом: последовательно  $x_i$  распределяются для  $C_1, \dots, C_m$  так, чтобы  $\sum_{x \in C_j} x$  не превышала значения  $y'$ .

**Алгоритм 2.** Проведенное профилирование параллельной работы программного комплекса показало, что за счет балансировки удалось достигнуть хорошего ускорения моделирования процессов кластеризации. Превалирующим фактором низкой эффективности работы программы стал последовательный участок кода расчета диффузионных потоков кластеров. Был применен метод параллелизма данных для расчета такого рода потоков. Каждому процессорному ядру делегируется просчет диффузии кластеров определенной размерности. Реализованный процесс параллельной работы определения диффузионных потоков кластеров следует в процессе моделирования вслед за этапом просчета кластеризации.

**Алгоритм 3.** При просчете диффузии кластеров интегрируемым образом система дифференциальных уравнений сводится к системе линейных уравнений, которая решается методом прогонки. Вычислительная ресурсоемкость данного решения невелика, превалирующим фактором становится передача данных. Поэтому, был применен комбинированный подход осуществления параллелизма (параллелизм данных и вычислений): объединение в один итерационный цикл моделирования процессов кластеризации и их диффузии. При этом динамическая балансировка загрузки процессорных узлов модифицируется следующим образом. Число ядер, используемых для расчета диффузионной составляющей вычислительного параллелизма, динамически увеличивается или уменьшается в зависимости от того какая из составляющих превалирует и определяет общее время вычислений. Балансировка загрузки процессорных ядер при моделировании процессов кластеризации осуществляется тем же образом, только уже на меньшем количестве узлов.

**Алгоритм 4.** На последнем этапе был осуществлен ряд уточняющих оптимизаций реализованных методов, применены новые подходы. Так, за счет асинхронных передач данных мастером частично заполняется время вычислений рабочими просчетом части непараллельной составляющей программы, которая независима от результатов кластеризации и диффузии. Также, ответственность за расчет балансировочных параметров делегируется одному из рабочих, который синхронизируясь с остальными, просчитывает и предоставляет каждому процессу сведения по объему работ следующего временного шага моделирования.

## 5. Результаты

Для оценки эффективности реализованных алгоритмов были проведены серии вычислительных экспериментов на вычислительном кластере “СКИФ Урал”[3]. Результаты общего времени моделирования и характеристики масштабируемости приведены в табл. 1.

Результаты прикладной и теоретической направленности изучения протекающих процессов подготавливаются к публикации отдельной статьей.

**Таблица 1.** Результаты общего времени счета и масштабируемости для 100 итерационных шагов

Число ядер	1	3	26	51	76	101	126	151	176	201
Время, сек.	6248,0	3151,1	264,5	133,5	93,4	75,2	63,7	56,3	51,5	47,6
Ускорение, разы	1,0	2,0	23,6	46,8	66,9	83,0	98,0	110,9	121,3	131,1
Эффективность, %	100	100	94,5	93,6	89,2	83,0	78,5	74,0	69,3	65,6

## 6. Заключение

В работе представлен подход организации программного комплекса моделирования газофазной конденсации металлических наночастиц под многопроцессорные кластерные вычислительные системы. Разработаны и представлены примененные методы и алгоритмы, направленные на максимально эффективное использование вычислительных мощностей кластерной установки. Программный комплекс реализован на языке Фортран, параллелизм программы обеспечивается при помощи библиотеки MPI. При проведении вычислительных экспериментов использовалось до 201 вычислительных ядра кластера «СКИФ Урал», при этом получена эффективность распараллеливания, составляющая не менее 65%.

Из полученных вычислительных экспериментов видно, что эффективность с ростом числа используемых процессорных элементов падает. Это связано с присутствием большого объема передаваемых данных и наличием последовательного участка программы, который выполняется процессом-мастером, что приводит к простоям рабочих. Решить вторую проблему можно посредством параллелизации последовательной логики. А вот для уменьшения затрат на передачу данных, видимо, нужен другой подход организации параллелизма. Для рассматриваемой задачи был применен параллелизм на основе топологии «мастер-рабочие», при котором большой объем данных моделирования является необходимым одновременно (в одном итерационном шаге) как для обработки рабочими, так и для синхронизации и обработки мастером. В дальнейшем предполагается для уменьшения задержек на передачу данных применить подход, при котором за каждым рабочим процессом закреплен определенный участок данных (ячейки камеры) и все синхронизационные взаимодействия осуществляются непосредственно между рабочими.

## Литература

1. Гельчинский Б.Р. Многомасштабное компьютерное моделирование процесса образования металлических наночастиц из расплава // Труды XII Российской конференции "Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов". / – 2008. – Т. 1. –С. 10-13.
2. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред. – М.: Наука, 1984. 519 с.
3. Высокопроизводительный вычислительный кластер «СКИФ Урал». URL: <http://skif-ural.susu.ac.ru>