УДК 519.6; 519.21; 519.245; 551; 521; 535.31; 535.36; 537.52 doi 10.26089/NumMet.v18r436

О ПАРАЛЛЕЛЬНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО (ПОСВЯЩАЕТСЯ ПАМЯТИ ГЛАВНОГО ТЕОРЕТИКА КОСМОНАВТИКИ АКАДЕМИКА М.В. КЕЛДЫША В ГОД 60-ЛЕТИЯ ЗАПУСКА ПЕРВОГО ИСЗ)

М. А. Марченко[1], Т. А. Сушкевич[2]

В 2017 году мировая общественность отмечает 60-летний юбилей запуска 4 октября 1957 года в СССР первого искусственного спутника Земли, положившего начало космической эры. Баллистические расчеты проводились на первой серийной ЭВМ "Стрела" в Институте Келдыша. При решении сложнейших задач создания "ракетно-ядерного щита" были заложены основы новых направлений в математике — вычислительной математики и математического моделирования. И в СССР и в США параллельно разрабатывались детерминированные и статистические численные методы. Методы Монте-Карло (ММК) как инструмент для прямого статистического моделирования были разработаны в США в рамках Манхэттонского проекта создания ядерного оружия. Джон фон Нейман первым предложил использовать саму ЭВМ для генерации случайных чисел. В 1949 году Джон фон Нейман и Станислав Улам предложили первый алгоритм получения псевдослучайных величин, который впоследствии был назван ММК и послужил основой для развития методики генерации псевдослучайных чисел с использованием ЭВМ. Разработка ММК и эффективность его применения всегда начинается с разработки генератора случайных или псевдослучайных чисел, который зависит от класса решаемых задач и конкретной структуры и архитектуры ЭВМ. Методы Монте-Карло стали массово применять на всех архитектурах вычислительных систем с параллельными и распределенными вычислениями. Сейчас в эпоху супервычислений преобладают ММК как следствие простоты их реализации. Но эта простота обманчива. В статье представлен разработанный отечественный комплексный методический подход, в котором на примере трех сложных "больших" задач, описывающих пространственно-неоднородные кинетические процессы диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, системно рассматриваются теория методов и алгоритмов ММК и практика их реализации в формате не просто программ, а также параллельных генераторов псевдослучайных чисел, библиотек программ, средств обработки данных, управляющих программ и т.д., т.е. все этапы создания "цифрового продукта". На примере вероятностных моделей для численного моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, когда ансамбли траекторий или частиц содержат по 10 в 7–13 степени элементов, продемонстрированы возможности и эффективность новых параллельных алгоритмов и распределенных вычислений ММК для решения "больших" и "сложных" задач не только для расчета отдельных функционалов или оценок, но и для всего фазового объема задачи. Это важнейшее достижение, которое повышает конкурентность ММК с детерминированными конечно-разностными и сеточными методами при параллельном моделировании.

Ключевые слова: информационно-математическое обеспечение, кинетические процессы, распределенные вычисления, метод Монте-Карло, компьютинг.

Введение. Посвящается 60-летию запуска в СССР ПЕРВОГО искусственного спутника Земли (ИСЗ) 4 октября 1957 года [1–3] и памяти Главного Теоретика Космонавтики [4–7], Президента Академии Наук СССР (19.05.1961–19.05.1975), математика-легенды Мстислава Всеволодовича Келдыша (10.02.1911–24.06.1978). М.В. Келдыш — единственный из математиков трижды Герой Социалистического Труда, который вместе с академиком Андреем Николаевичем Тихоновым, дважды Героем Социалистического Труда, в 1953 году основал ПЕРВЫЙ в мире Институт прикладной математики для выполнения "атомного",

[1] Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, проспект академика Лаврентьева, д. 6, 630090, Новосибирск; Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, ул. Пирогова, д. 2, 630090, Новосибирск; заведующий лабораторией, д.ф.-м.н., e-mail: marchenko@sscc.ru

[2] Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Миусская пл., д. 4, 125047, Москва; главный научный сотрудник, д.ф.-м.н., заслуженный деятель науки, e-mail: tamaras@keldysh.ru

и "ракетно–космического" проектов и создания "ракетно-ядерного щита" на основе достижений математики с использованием вычислительной техники. В середине XX-го века атомный и ракетно-космический проекты, в которых противостояли и конкурировали СССР и США, способствовали изобретению ЭВМ и формированию новых научных направлений в математике (вычислительная математика, математическое моделирование, статистические и детерминированные численные методы, методы Монте-Карло (ММК), конечно-разностные и сеточные методы и т.д.) и новых дисциплин ("computer sciences", информационные технологии и компьютинг).

Был заложен фундамент современной "вычислительной математики" и "математического моделирования", основоположниками которых являются А.Н. Тихонов и А.А. Самарский [8], С.Л. Соболев, Е.С. Кузнецов [9], В.С. Владимиров [10] (Сталинская премия в 1953 г.), Г.И. Марчук [11] — ведущие ответственные участники "атомного" проекта, которые разработали детерминированные численные конечно-разностные методы и обеспечили "вычислительные эксперименты" для создания атомной и водородной бомбы, а также первой в мире Обнинской атомной станции (июнь 1954 г.). Параллельно участники советского "атомного" проекта И.М. Гельфанд, Н.Н. Ченцов [12], Г.А. Михайлов, Г.И. Марчук, С.М. Ермаков [13–15], В.Г. Золотухин, И.М. Соболь [16–18] разрабатывали статистические методы и методы Монте-Карло. Звание Героя Социалистического труда С.Л. Соболев получил в 1951 г. за "атомную" бомбу, а А.Н. Тихонов — за "водородную" бомбу в одном Указе Верховного Совета СССР от 04 января 1954 года с А.Д. Сахаровым, Л.Д. Ландау, И.Е. Таммом, А.П. Александровым. Ленинские премии за решение задач ядерной техники получили математики: в 1961 г. И.М. Гельфанд и Г.И. Марчук, а в 1962 г. А.А. Самарский и Г.А. Михайлов (в возрасте 28 лет!, аспирантуру закончил в Институте Келдыша под руководством И.М. Гельфанда и Н.Н. Ченцова).

Постановлением Центрального Комитета КПСС и Совета Министров Союза СССР от 1 ноября 1979 года "за цикл работ по развитию и применению метода статистического моделирования для решения многомерных задач теории переноса излучения" присуждена Государственная Премия СССР (в составе коллектива: академик, директор Вычислительного центра Сибирского отделения Академии наук СССР Г.И. Марчук — руководитель работы, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией того же Вычислительного центра Г.А. Михайлов, доктор физико-математических наук, профессор Ленинградского государственного университета имени А.А. Жданова С.М. Ермаков, доктор физико-математических наук, заместитель директора Института космических исследований Академии наук СССР В.Г. Золотухин, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Математического института Академии наук СССР Н.Н. Ченцов).

Почти 500 лет прошло от появления первых элементов "теории вероятностей" в XV-м веке до создания математического аппарата стохастических методов и практической направленности ММК в 1940-х годах, когда потребовалось выполнять расчеты атомных реакторов и атомного оружия в рамках Манхэттенского проекта. В 40–50-ые годы XX-го века: несмотря на высочайшие достижения русских ученых в теории вероятностей и статистики, первые генераторы случайных чисел и алгоритмы ММК как инструмент для прямого статистического моделирования были разработаны в США в рамках Манхэттонского проекта создания ядерного оружия, в котором приняли участие ученые из разных стран. В целом теоретическая основа ММК была известна давно. Некоторые задачи статистики рассчитывались иногда с помощью случайных выборок, т.е. фактически ММК. Однако до появления ЭВМ этот метод не мог найти сколько-нибудь широкого применения, так как моделировать случайные величины вручную — очень трудоемкая работа. При появлении первых ЭВМ стало ясно, что ни один существующий на тот момент генератор случайных чисел не обладает достаточным быстродействием для использования его в программах. Джон фон Нейман первым предложил использовать саму ЭВМ для генерации случайных чисел. В 1949 году Джон фон Нейман и Станислав Улам предложили первый алгоритм получения псевдослучайных величин, который впоследствии был назван ММК и послужил основой для развития методики генерации псевдослучайных чисел с использованием ЭВМ. Он был усовершенствован специалистами корпорации RAND и применялся при разработке технологии ядерного взрыва.

Так что создателями ММК считают американских математиков Дж. Неймана и С. Улама. Датой рождения ММК принято считать 1949 год, когда появился термин "метод Монте-Карло", отраженный даже в названии первой публикации математиков, привлеченных к работе в Лос-Аламосской лаборатории [19]. В честь Николаса Метрополиса, который занимался разработкой первых ЭВМ и основ ММК, назван Вычислительный центр Лос-Аламосской национальной лаборатории "Nicholas C. Metropolis Center for Modeling and Simulation", где в настоящее время располагаются мощнейшие суперкомпьютеры планеты и до сих пор отдают предпочтение ММК. Одной из первых открыто опубликованных зарубежных работ, посвященных математическому обоснованию ММК, является доклад 1956 года [20].

В отечественной литературе первые работы по теории ММК так же принадлежат участникам атомного проекта, который в СССР выполнялся в режиме повышенной секретности. Но были и открытые публикации, которые тоже относятся к 1950-м годам, т.е. работы по ММК в США и СССР шли одновременно. В 1955 г. вышли три открытые публикации о приложениях ММК [21–23]. В 1954–1956 гг. В.С. Владимиров принимал активное участие в разработке артиллерийского ядерного снаряда — малогабаритного атомного заряда. Задачи переноса нейтронов в цилиндрически-симметричных областях, с которыми ему пришлось иметь дело в этой работе, стимулировали его занятия ММК. В 1956 году Василием Сергеевичем открыто опубликована первая в нашей стране теоретическая математическая статья по ММК [24].

В условиях строжайшей секретности в СССР изобрели ЭВМ. Проектом создания ЭВМ с 1947 года руководил М.В. Келдыш; в Институте Келдыша в 1954 году ввели в строй первую серийную ЭВМ "Стрела". С тех пор в отечественной науке существуют и развиваются и детерминированные и статистические подходы к решению сложных и больших задач. Однако замечено, что сейчас в эпоху супервычислений преобладают ММК как следствие их простоты реализации (обманчивое представление) и доступности готовых зарубежных "цифровых продуктов". Из-за технической простоты распараллеливания алгоритмов ММК абсолютное большинство вычислителей и пользователей либо используют ММК, исходя из простых эвристических представлений, не задумываясь о вычислительных проблемах, либо исследуют и приспосабливают частные задачи к имеющемуся в распоряжении или в доступности компьютеру, либо без размышлений вслепую используют чужие "программные продукты" или программы из электронных библиотек типа "Mathematica", преимущественно зарубежных. В статье кратко представлены новые отечественные достижения реализации ММК на суперкомпьютерах.

1. Постановка задачи. История параллельных вычислений насчитывает более 50 лет [25–26] и на данном этапе уже сформировалось новое научное направление и даже специальное "Суперкомпьютерное образование" [27–28]. С 80-х годов детерминированные методы и алгоритмы параллельных вычислений для численного решения кинетического уравнения Больцмана разрабатывает коллектив под руководством Т.А. Сушкевич [29–32]. Известный факт: ММК занимает ведущее место в параллельных вычислениях с появлением первых же вычислительных систем, кластеров, суперкомпьютеров и даже web и грид-технологий. Однако отсутствуют издания с системным изложением проблем и обоснований применимости ММК для параллельных вычислений, а теоретический аспект отражен в единственной монографии [33]. Новые результаты коллектива ИВМиМГ СО РАН с приложениями ММК, представленные в [34] (2016 г.) и М.А. Марченко [35] (2017 г.), существенно восполняют этот пробел.

В настоящей статье кратко изложены новые результаты первого комплексного научно-фундаментального исследования и обоснования теории и практики применения параллельных алгоритмов ММК [35], в котором содержатся все этапы и компоненты разработки современного "цифрового продукта", учитывающего мировые достижения ММК как аппарата решения сложнейших задач атомного и космического проектов в середине XX-го века. Представлен методический подход к решению сложнейших проблем, в котором на примере трех "больших" задач, описывающих пространственно-неоднородные кинетические процессы диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, системно рассмотрены теория методов и алгоритмов ММК и практика их реализации в формате не просто программ, но и параллельных генераторов псевдослучайных чисел, библиотек программ, средств обработки данных, управляющих программ и т.д., т.е. все этапы создания "цифрового продукта".

Эффективность работы [35], выполненной в единственной в мире научной школе по методам статистического моделирования и Монте-Карло (основана Г.И. Марчуком и Г.А. Михайловым в 1965 году; в настоящее время руководитель член-корреспондент Г.А. Михайлов — ветеран ММК со стажем около 60 лет), обусловлена единством теории и практики и предопределена высокой квалификацией исполнителей в теории методов и алгоритмов Монте-Карло и большим опытом практической работы в области технологий параллельных реализаций программ на распределенных вычислительных системах.

Владея фундаментальными знаниями по теории методов и алгоритмов ММК, можно сосредоточиться на освоении вычислительной техники и компьютеров нового поколения с распределенными вычислениями и развивать теоретические основы параллельных вычислений для математического моделирования стохастических процессов и динамических систем методом Монте-Карло. Начиная с 2000 г., использовали все доступные средства. Впервые считали задачи на самодельной "Грид-системе" из персоналок в ИВМиМГ СО РАН (разработана библиотека MONC) в 2001 г., затем на кластере МВС-1000 (достался из МСЦ РАН) и на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН, далее на кластере МВС-10П в МСЦ РАН. Начинаются работы по внедрению и развитию результатов и программ на новых общих ресурсах суперкомпьютерных систем МСЦ РАН и ЦКП ССКЦ СО РАН, введенных в действие в 2017 г.

2. Параллельные алгоритмы. Речь идет о проблемах ММК и новых результатах [35], связанных с разработкой, исследованием и обоснованием возможностей и эффективности реализации ММК для математического моделирования и параметрического анализа вероятностных моделей стохастических процессов и динамических систем на высокопроизводительных вычислительных системах и суперкомпьютерах с распределенными параллельными вычислениями. Теоретические исследования и практическая реализация, включая тестовые и методические расчеты и обработку результатов с визуализацией характеристик развития процессов, проведены на примере трех трудоемких задач с кинетическими процессами диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц.

Объектом исследований являются вероятностные модели для численного моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, когда ансамбли траекторий или частиц содержат по 10 в 7–13 элементов. Вероятностная модель кинетического процесса — это такое конструктивное описание процесса с использованием случайных величин, которое позволяет построить численный алгоритм для компьютерного моделирования реализаций случайного объекта значений случайной величины или случайного процесса, и при этом величины выборочных средних, вычисленных для выборки из реализаций такого объекта, должны давать адекватные оценки интегральных характеристик рассматриваемого кинетического процесса. Такие модели строятся на основе вероятностных представлений для уравнений математической физики — кинетических уравнений Больцмана, коагуляции, диффузии в достаточно общих пространственно-неоднородных постановках и с учетом разнообразных физико-химических процессов. Численное решение подобных задач относится к классу супервычислений и на их примере продемонстрированы возможности и эффективность ММК для решения "больших" и "сложных" задач не только для расчета отдельных функционалов или оценок, но и для всего фазового объема задачи. Это важнейшее достижение, которое повышает конкурентность ММК с детерминированными конечно-разностными и сеточными методами.

Разработка ММК всегда начинается с разработки генератора случайных или псевдослучайных чисел, который зависит от класса решаемых задач и конкретной структуры и архитектуры ЭВМ. Теоретически проблема рассматривалась А.Н. Колмогоровым. Он показал, что сложность алгоритма, который генерировал бы числа, неотличимые от настоящих случайных (все аксиомы выполнены), должна быть бесконечной. Это результат отрицательный, невозможны алгоритмы, приближенно имитирующие случайность. С.М. Ермаков показал, что при достаточно больших значениях параметров датчика выполняются закон больших чисел и центральная предельная теорема. Это вполне строгий результат в отличие от результатов Марсальи [36], который показывает, что при малых параметрах плохо. При больших значениях параметров все в порядке [35]. Краткое изложение результатов есть в первой части книги [33]. Близкие результаты (без предельной теоремы) приведены во втором томе Кнута [37].

Важное направление связано с ключевыми проблемами, без которых невозможно реализовать параллельные супервычисления методом Монте-Карло, — это распределительный способ получения псевдослучайных чисел и методика распределенного численного статистического моделирования. Генерацию случайных чисел и параллельных потоков случайных чисел для расчетов Монте-Карло разработали Л.Ю. Бараш и Л.Н. Щур [38, 39], но без теоретических обоснований. Марченко [35] проведены исследования и разработаны генераторы и управляющие программы для двух типов вычислительных систем с распределенными вычислениями:

1) массивно-параллельная вычислительная система — это однородная (из одинаковых процессоров или вычислительных ядер) система с распределенной памятью, где у каждого процессора (вычислительного ядра) своя оперативная память; процессоры при этом обычно объединены в вычислительные узлы, причем в самой вычислительной системе вычислительные узлы могут иметь различную производительность;

2) гибридная вычислительная система — это система, состоящая из вычислительных узлов, на каждом из которых расположены основные процессоры (CPU) и многоядерные сопроцессоры (например, Intel Xeon Phi или Nvidia GPU).

При распределении псевдослучайных чисел учитываются особенности параллельного алгоритма и тип используемой вычислительной системы:

— массивно-параллельные вычислительные системы для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо на разных процессорах (вычислительных ядрах);

— массивно-параллельные вычислительные системы для случая, когда моделирование каждой реализации осуществляется совместно на нескольких процессорах;

— гибридные вычислительные системы для случая, когда моделирование отдельных реализаций осуществляется независимо как на вычислительных ядрах основного процессора, так и на вычислительных ядрах сопроцессора;

— гибридные вычислительные системы для случая, когда моделирование каждой реализации осуществляется совместно на вычислительных ядрах основного процессора и на вычислительных ядрах сопроцессора.

Сразу было замечено (возможно, впервые на это указал Метрополис), что очень много машинного времени тратится на разыгрывание траекторий частиц, которые не внесут существенного вклада в значение рассчитываемой величины. Для устранения этого недостатка разрабатываются разнообразные методы оптимизации, среди них отдельной группой являются весовые методы и методы зависимых испытаний. Марченко [35] разработаны и исследованы параллельные реализации алгоритмов ММК с разными приемами оптимизации, которые накоплены в научной школе Г.А. Михайлова, а не простые алгоритмы прямого статистического моделирования, которые наиболее массово распространены на разных вычислительных платформах!

Для прецизионной и малотрудоемкой оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов, таких как вероятность недостижения границы области за заданное время и полная концентрация траекторий в точке за заданное время, применены метод расщепления и весовое моделирование с использованием приближения к функции ценности, а также их комбинация с распределенным численным статистическим моделированием. Для оценки вероятности аналитически и численно применяется зависимость величины трудоемкости от длины временного интервала и размера шага интегрирования.

Для построения алгоритмов численного статистического моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции рассматривается линейное уравнение Колмогорова для многочастичной плотности распределения частиц (т.н. основное кинетическое уравнение) и его представление в виде интегрального уравнения Фредгольма второго рода. Для уравнения Колмогорова известна связь с нелинейным уравнением коагуляции в пределе при увеличении числа частиц. Здесь применяются алгоритмы прямого статистического моделирования с использованием метода мажорантной частоты. Трудоемкость такого метода линейно зависит от числа тестовых частиц, т.е. он является экономичным.

При этом ясно, что для достижения заданной точности оценки функционалов число модельных частиц должно быть достаточно большим. Вследствие этого моделирование одной реализации ансамбля должно осуществляться совместно на нескольких вычислительных процессорах. При этом возникает важная задача оценки эффективности распараллеливания при одновременном увеличении числа процессоров и начального числа частиц. Такая задача оценки алгоритмов решается на основе теоретических построений, отражающих зависимость вычислительной трудоемкости от параметров алгоритма [35].

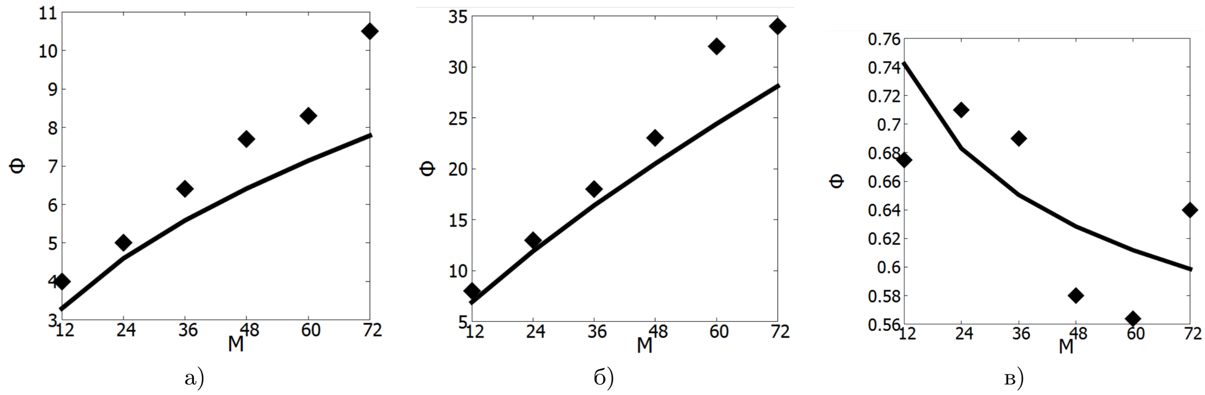


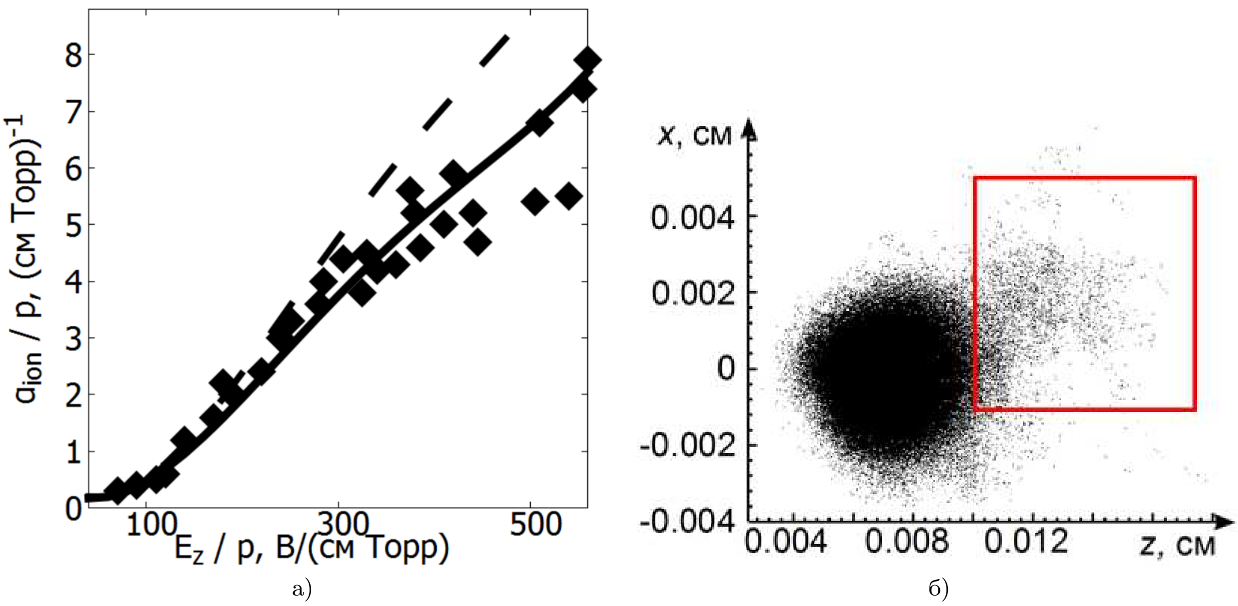
Рис. 1. Задача моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции. Зависимость величины ускорения от распараллеливания Φ от числа процессоров M при разных значениях параметра d: $d = 0.7$ (а); $d = 1.0$ (б); $d = 0.1$ (в) (сплошная линия — теоретическая оценка, ромбики — результаты расчетов)

А именно, рассмотрим нелинейную зависимость величины начального числа частиц N_0 от числа процессоров M: $N_0 \sim M^d$, $0 \leqslant d \leqslant 1$. На рис. 1 приведены результаты численных экспериментов на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН с использованием разработанных нами параллельной программы `COAGULATION-MC` и библиотеки `PARMONC` [35]. Результаты подтверждают полученные нами теоретические выводы о зависимости ускорения от распараллеливания от числа процессоров.

Для моделирования процессов развития электронной лавины в газе необходимо решать уравнение Больцмана, с этой целью используется метод численного статистического моделирования траекторий ветвящихся процессов. Он позволяет учесть влияние маловероятных процессов, что практически невозможно для других численных моделей. При всех достоинствах данного метода нужно обратить особое внимание на то, что в оперативной памяти компьютера приходится хранить координаты всех электронов и ионов лавины в шестимерном фазовом пространстве (т.е. моделируемых частиц, для каждой из которых необходимо решать уравнения движения), число которых лавинообразно нарастает. Для решения этой проблемы можно использовать различные методы укрупнения (например, когда моделируемая частица представляется в виде облака, содержащего в себе несколько элементарных частиц), но такой подход приводит к уменьшению точности моделирования.

Целесообразно, однако, учитывать траектории каждого отдельно взятого электрона и использовать для моделирования эффективные технологии распараллеливания на многопроцессорных высокопроизводительных вычислительных системах. При разработке параллельного алгоритма также применяются специальные методы моделирования распределений, лексикографическая схема реализации ветвления траекторий, "русская рулетка" (т.е. удаление частиц из лавины с заданной вероятностью и соответствующим пересчетом параметров моделирования), обоснованное построение гистограммы и полигона частот и вычисление вероятностной погрешности оценок функционалов. Для верификации величин параметров (например, величины шага по времени) используется разработанная методика распределенного численного статистического моделирования.

В проведенных нами на кластере НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН расчетах с использованием разработанных нами параллельной программы `ELSHOW` и библиотеки `PARMONC` [35] продемонстрировано хорошее совпадение результатов с известными экспериментальными данными, а также с данными расчетов с использованием программы `BOLSIG+` (описана в работе G. Hagelaar, L.C. Pitchford, 2005) (см. рис. 2,а). Показано также, что при численном статистическом моделировании лавины увеличение величины напряжения приводит к образованию наблюдаемых в эксперименте "хвостов" высокоэнергетичных (убегающих) электронов (выделены прямоугольником на рис. 2,б).



а) б)

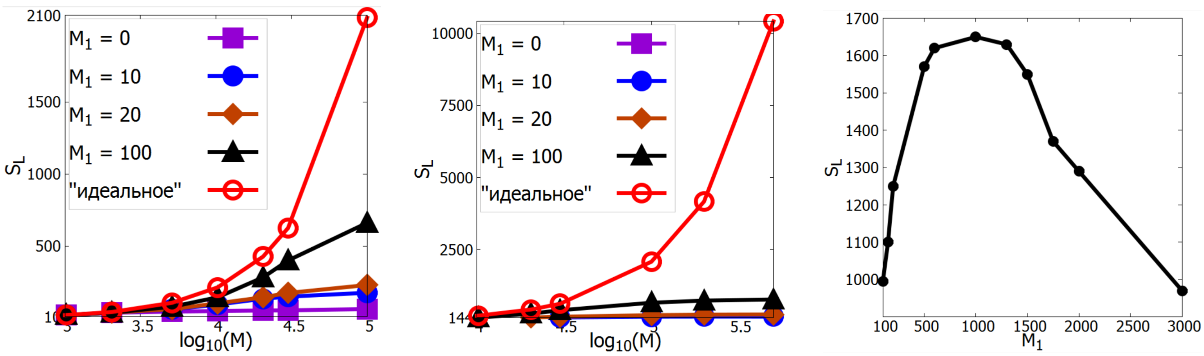
Рис. 2. Задача моделирования процессов развития электронной лавины в газе. Результаты расчетов: а) сравнение зависимости приведенного коэффициента ударной ионизации $\alpha_{\rm ion}/p$ от E_z/p: сплошная линия — результаты расчетов с помощью программы `ELSHOW`; пунктирная линия — результаты расчетов с использованием программы `BOLSIG+`; ромбы — экспериментальные данные; б) моделирование убегающих электронов: сечение реализации электронной лавины в плоскости XZ при $E_z/p = 500$ В/(см Торр)

Важное по значимости достижение — это разработка и реализация имитационной модели исполнения программ распределенного численного статистического моделирования и оценки масштабируемости задач. Разработанные параллельный генератор и методика распределенных вычислений рекомендуются для решения практических задач на современных и перспективных суперкомпьютерах, в частности, для параметрического анализа вероятностных моделей; предложенная имитационная модель исполнения программ может применяться для оценки масштабируемости конкретных задач на реальных вычислительных системах и настройки соответствующих параметров параллельных расчетов.

Было проведено исследование масштабируемости параллельной программы для решения конкретной задачи динамики разреженных газов (работа М.С. Иванова и С.В Рогазинского, 1988). В имитационной модели учитывалась архитектура кластера НКС-30Т в ЦКП ССКЦ СО РАН. Рассматриваются две схемы связи между процессорами: **схема 1** с одним центральным процессором-сборщиком, на который процессоры-вычислители периодически отправляют результаты; **схема 2** с дополнительными процессорами-сборщиками, связанными с центральным; при этом процессоры-вычислители поделены на группы, каждая из которых связана с соответствующим дополнительным процессором-сборщиком. Исследовалась зависимость от общего числа процессоров M величины ускорения от распараллеливания $S_L(M, M_1, M_{\min}) = T_L(M_{\min}, M_1)/T_L(M, M_1)$, где L — общее число реализаций, полученных совокупно на всех процессорах, M_1 — число дополнительных процессоров-сборщиков, $T_L(M, M_1)$ — машинное время на центральном процессоре-сборщике, затраченное на получение и сохранение результатов, $M_{\min}$ — наименьшее число процессоров, использованных при расчетах.

Показано, что в схеме 2 для $M \sim 10^5 \div 10^6$ при увеличении M_1 зависимость S_L от M становится ближе к “идеальной” ($S_L(M) = M$), в то время как схема 1 практически неэффективна. На рис. 3а,б приведены оценки поведения ускорения S_L с помощью имитационного моделирования: для каждого $M_1 = 10, 20, 100$ процессоры-вычислители делились на соответствующее число групп; при фиксированных значениях M_1 рассматривались $M = 10^5, 5 \times 10^5$ моделируемых процессоров.

Для рассматриваемой задачи ставился вопрос о максимальном значении ускорения S_L в зависимости от M_1. С этой целью в имитационной модели при фиксированном значении $M = 10^6$ варьировалось значение M_1, а также соответствующее число процессоров-вычислителей в каждой группе, связанной со своим процессором-сборщиком. На рис. 3,в показана зависимость S_L от M_1; делается вывод, что оптимальное значение $M_1 \approx 1000$.



а) б) в)

Рис. 3. Разработка имитационной модели исполнения программ распределенного численного статистического моделирования и оценки масштабируемости задач. Зависимость ускорения S_L от общего числа моделируемых процессоров M при разном числе процессоров-сборщиков M_1: $M = 10^5$ (а); $M = 5 \times 10^5$ (б); случай $M_1 = 0$ соответствует схеме 1; в) зависимость ускорения S_L от числа дополнительных процессоров-сборщиков M_1 при фиксированном числе моделируемых процессоров $M = 10^6$

3. Информационно-математическая система. Реализованная информационно-математическая модель, кроме теории, метода, алгоритмов, содержит стандартное прикладное программное обеспечение для высокопроизводительных вычислительных систем, внедренное и апробированное в ряде центров [35], в том числе:

— параллельные генераторы псевдослучайных чисел;

— стандартные библиотеки для исполнения программ распределенного численного статистического моделирования;

— параллельные прикладные программы для решения задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц.

При этом решена задача оценки масштабируемости параллельных программ численного статистического моделирования на большое число процессоров.

Успешное проведение серийных расчетов по методу численного статистического моделирования требует наличия стандартных распараллеленных программных инструментов, с помощью которых пользователь может максимально просто получать необходимые оценки функционалов и соответствующей статистической погрешности. Важно, чтобы в процессе адаптации программы к инструменту применялись стандартные процедуры. С другой стороны, такие инструменты должны быть реализованы для различных архитектур высокопроизводительных вычислительных систем: массивно-параллельных, гибридных, а также грид-систем. Удовлетворяющие таким требованиям библиотеки программ разработаны с использованием свойств крупноблочной структуры алгоритмов численного статистического моделирования [35].

В рамках нового научного направления — параллельное статистическое моделирование кинетических процессов на современных высокопроизводительных вычислительных системах — реализованы эффективные численные методы и алгоритмы ММК в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента [35]:

— быстродействующие длиннопериодные параллельные генераторы базовых псевдослучайных чисел PARGENER-MC; с их использованием разработана и апробирована методика распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем, обеспечивающая возможность проведения коррелированных расчетов и параметрического анализа вероятностных моделей;

— имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах, основанная на применении мультиагентного подхода, с целью получения оценок масштабируемости программ на большое число процессоров;

— универсальные библиотеки PARMONC, PARMONC-PC и MONC для распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах, а также новый программный комплекс параллельных генераторов PARGENER-MC;

— параллельные прикладные программы BOUNDARY-MC, CONCENTRATION-MC, COAGULATION-MC, ELSHOW, используемые для решения задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, и параллельная программа AMIKS для численного анализа стохастических осцилляторов.

Для проведения прецизионных серийных расчетов используется программная библиотека PARMONC, включающая в себя эффективную реализацию упомянутого выше параллельного длиннопериодного генератора псевдослучайных чисел. Для проведения расчетов используются вычислительные ресурсы Центра коллективного пользования “Сибирский суперкомпьютерный центр” СО РАН и Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН в Москве.

Заключение. Представленные результаты научно-фундаментального исследования методов Монте-Карло — это важный этап в качественно новом развитии и теоретическом обосновании ММК, создании отечественных “цифровых продуктов” и значительном расширении сферы приложений численного статистического моделирования с массовым параллелизмом, а также подтверждение нашего паритета и даже наших приоритетов в мировой науке.

Это первое системное исследование теории ММК с практикой реализации параллельных вычислений, включая параллельные генераторы псевдослучайных чисел, которое продемонстрировало существенно новые перспективы расширения возможностей и сферы приложений ММК в супервычислениях и “цифровой цивилизации”.

Основным научным достижением является разработка новых вероятностных моделей кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц на основе использования многочастичных ансамблей и реализующих их экономичных методов численного статистического моделирования с применением методики распределенных вычислений, обеспечивающей возможность параметрического анализа. На примере этих трех “больших” задач проведено исследование параллельных вычислений ММК, имеющее фундаментальное значение для расширения практики внедрения ММК на суперкомпьютерах.

Возникновение, развитие и применение ММК как весьма универсального инструмента численного решения “сложных” и “больших” задач стало возможным только благодаря появлению ЭВМ и в век “цифровой цивилизации” существенно расширяется сфера приложений ММК — это задачи не только нейтронной и атомной физики, которые стимулировали формирование ММК, но и разнообразные задачи математической и теоретической физики, ядерной и лазерной физики, гидрооптики и атмосферной оптики, переноса излучения в искусственных и природных средах, радиофизики, аэродинамики, гидродинамики, магнитодинамики, электродинамики, фотоники, квантовой механики, астрофизики, химии, биологии, экологии, климата и эволюции Земли, медицины и фармакологии, социологии и демографии, безопасности технических объектов, теории катастроф и рисков и т.д. К разделам науки, где все в большей мере используется ММК, следует отнести задачи теории массового обслуживания, задачи теории игр и математической экономики, задачи теории передачи сообщений при наличии помех и ряд других, допускающих теоретико-вероятностную трактовку и естественный параллелизм.

Разработанные библиотеки PARMONC, PARMONC-PC, MONC и параллельные программы AMIKS, внедренные в несколько центров, — это инструментарий для реализации распределенного численного статистического моделирования, который можно рекомендовать для решения широкого круга практических задач методом Монте-Карло с массово-распределенными вычислениями и с использованием современных и перспективных суперкомпьютеров. Получены Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ, подтверждающие практическую значимость результатов [35].

Исследование частично поддерживается грантами Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 15–01–00783, 15–01–08988, 15–01–09230, 15–01–00894, 16–01–00755, 16–01–00530, 17–01–00220) и Программой фундаментальных научных исследований РАН (проект Президиума I.33П и ОМН–3.5).

Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции “Суперкомпьютерные дни в России 2017” (http://russianscdays.org).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 4 октября 1957 года начало космической эры. Первая космическая. Сборник статей, посвященных пятидесятилетнему юбилею запуска Первого искусственного спутника Земли. М.: ИКИ РАН, ООО “’Регион Инвест”, 2007. 169 с.
2. Прикладная небесная механика и управление движением. Сборник статей, посвященный 90-летию со дня рождения Д.Е. Охоцимского / Сост. Энеев Т.М., Овчинников М.Ю., Голиков А.Р. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2010. 368 с. [Электронный ресурс] URL: http://keldysh.ru/memory/okhotsimsky/index.htm.
3. *Бегиева-Кучмезова Р.* Свет звезды и свечи. К 90-летию Тимура Магометовича Энеева. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2015. 192 с.
4. *Келдыш М.В.* Творческий портрет по воспоминаниям современников. М.: Наука, 2001. 416 с.
5. Мстислав Всеволодович Келдыш. 100 лет со дня рождения / ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Сост. Езерова Г.Н., Попов Ю.П. Ярославль: ООО Изд-во РМП, 2011. 344 с.
6. Мстислав Келдыш. Серия “ВЕЛИКИЕ УМЫ России” / Под ред. Губарева В.С. Вып. 2. М.: Издательский дом “Комсомольская правда”, 2016. 96 с.
7. Информационная система “Архивы Российской академии наук” (ИСАРАН): Фонд М.В. Келдыша (Научные труды и материалы к ним, биографические документы, документы по деятельности, переписка, труды и материалы других лиц), 2017. [Электронный ресурс] URL: http://isaran.ru/?q=ru/opis guid=31F9162F-4408-4E75-A1B2-A76BF7C46345 ida=48.
8. *Тихонов А.Н.* Собрание научных трудов. Том 2. Математика: Вычислительная математика. Математическая физика / Ред.-сост. Сушкевич Т.А., Гулин А.В. М.: Наука, 2009. 590 с.
9. *Кузнецов Е.С.* Избранные научные труды (в связи со 100-летием со дня рождения) / Отв. ред. и сост. Сушкевич Т.А. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 784 с.
10. *Владимиров В.С.* Математические задачи односкоростной теории переноса частиц // Тр. МИАН им. В.А. Стеклова. Вып. LXI (61). М.: Изд-во АН СССР, 1961. 158 с.
11. *Марчук Г.И.* Численные методы расчета ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1958. 381 с.
12. *Ченцов Н.Н.* Избранные труды. Математика. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. 400 с.
13. *Ермаков С.М., Михайлов Г.А.* Статистическое моделирование. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1982. 296 с.
14. *Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А., Дарбинян Р.А.* Решение прямых и некоторых обратных задач атмосферной оптики методом Монте-Карло. Новосибирск: Наука, 1968. 100 с.
15. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике / Под ред. Марчука Г.И. Новосибирск: Наука, 1976. 283 с.
16. *Бусленко Н.П., Голенко Д.И., Соболь И.М., Срагович В.Г., Шрейдер Ю.А.* Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло). М.: ГИФМЛ, 1962. 334 с.
17. *Соболь И.М.* Метод Монте-Карло. Популярные лекции по математике. М.: Наука, 1968. 64 с.
18. *Соболь И.М.* Численные методы Монте-Карло. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1973. 312 с.
19. *Metropolis N., Ulam S.* The Monte Carlo method // J. Amer. statistical assoc. 1949. Vol. 44, N 247. 335–341.
20. *Albert G.E.* A general theory of stochastic estimates of the Neumann series for the solution of certain Fredholm integral equations and related series // Sympos. on Monte Carlo Methods, ed. Meyer H.A. Wiley. 1956. 37–46.
21. *Чавчанидзе В.В.* Метод случайных испытаний (метод Монте-Карло) // Труды Института физики АН Грузинской ССР. Вып. 3. Тбилиси: Изд-во АН Грузинской ССР, 1955. 105 с.
22. *Чавчанидзе В.В.* Применение метода случайных испытаний к расчету внутриядерного каскада // Известия АН СССР. Серия физическая. 1955. **19**, № 6. 629–638.
23. *Шрейдер Ю.А.* Метод статистических проб (Монте-Карло) и его использование в цифровых машинах // Приборостроение. 1955. № 7. 1–5.
24. *Владимиров В.С.* О применении метода Монте-Карло для отыскания наименьшего характеристического числа и соответствующей собственной функции линейного интегрального уравнения // Теория вероятностей и ее применения. 1956. **1**, № 1. 113–130.
25. *Воеводин В.В.* Некоторые машинные аспекты распараллеливания вычислений. Препринт ВИНИТИ. № 22. М.: 1981. 10 с.
26. *Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.* Параллельные вычисления. Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2002. 608 с.

27. *Воеводин В.В.* Вычислительная математика и структура алгоритмов. М.: Изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010. 168 с. (Серия "Суперкомпьютерное образование").
28. *Якобовский М.В.* Введение в параллельные методы решения задач. М.: Изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 2013. 328 с. (Серия "Суперкомпьютерное образование").
29. *Сушкевич Т.А., Стрелков С.А., Иолтуховский А.А.* Метод характеристик в задачах атмосферной оптики. М.: Наука, 1990. 296 с.
30. *Сушкевич Т.А.* Математические модели переноса излучения. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. 661 с. (при поддержке РФФИ)
31. *Сушкевич Т.А., Козодеров В.В., Кондранин Т.В., Стрелков С.А., Дмитриев Е.В., Максакова С.В.* Параллельные вычисления в задачах космического экологического мониторинга и гиперспектрального дистанционного зондирования Земли // Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений: Труды Международной суперкомпьютерной конференции, (г. Новороссийск, 17–22 сентября 2012 года). М.: Изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 2012. 320–324.
32. *Сушкевич Т.А., Стрелков С.А., Максакова С.В.* Информационно-математическое обеспечение аэрокосмических систем дистанционного зондирования и радиационного форсинга на климат Земли для прогноза последствий освоения региона Арктики и суперкомпьютинг // СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ДНИ В РОССИИ: Труды международной конференции. М.: Изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 2015. 163–169.
33. *Ермаков С.М., Сипин А.С.* Метод Монте–Карло и параметрическая разделимость алгоритмов. Санкт-Петербург: Изд-во С.-Петербургского университета, 2014. 248 с.
34. *Артемьев С.С., Марченко М.А., Корнеев В.Д., Якунин М.А., Иванов А.А., Смирнов Д.Д.* Анализ стохастических колебаний методом Монте-Карло на суперкомпьютерах. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2016. 294 с. (при поддержке РФФИ).
35. *Марченко М.М.* Численное статистическое моделирование кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц с использованием распределенных вычислений. Диссерт. докт. физ-мат. наук. Новосибирск, ИВМиМГ СО РАН, 2017. 281 с. [Электронный ресурс] https://icmmg.nsc.ru/ru/content/marchenko-mihail-aleksandrovich-0.
36. The Marsaglia Random Number CDROM including the Diehard Battery of Tests of Randomness: [Электронный ресурс] http://stat.fsu.edu/pub/diehard/ 31.08.2016.
37. *Кнут Д.Э.* Искусство программирования. Т. 2. Получисленные алгоритмы / Пер. с англ. 3-е издание. М.: Вильямс, 2001. 832 с.
38. *Бараш Л.Ю., Щур Л.Н.* Генерация случайных чисел и параллельных потоков случайных чисел для расчетов Монте-Карло // Моделирование и анализ информационных систем. 2012. **19**, № 2. 145–161.
39. *Barash L.Y., Shchur L.N.* Program library for random number generation. More generators, parallel streams of random numbers and Fortran compatibility // Computer Physics Communications. 2013. Vol. 184. 2367–2369.

Поступила в редакцию
09.11.2017

Parallel Simulation of Kinetic Processes by Monte Carlo Method (Dedicated to the Memory of the Chief Theoretician of Cosmonautics Academician M.V. Keldysh in the 60th Anniversary of the Launch of the First Artificial Sputnik)

M. A. Marchenko[1] and T. A. Sushkevich[2]

[1] *Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; prospekt Lavrentyeva 6, Novosibirsk, 630090, Russia; Dr. Sci., Head of Laboratory; Novosibirsk State University, ulitsa Pirogova 2, Novosibirsk, 630090, Russia; Associate Professor, e-mail: marchenko@sscc.ru*

[2] *Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences; Miusskaya ploshchad' 4, Moscow, 125047, Russia; Dr. Sci., Leading Scientist, e-mail: tamaras@keldysh.ru*

Received November 9, 2017

Abstract: In 2017, the global community celebrates the 60th anniversary of the launch on 4 October 1957 in USSR of the first Earth sputnik, which ushered the space age. The ballistic calculations were conducted on the first production computer "Strela" in the Keldysh Institute. When solving the most complicated problems of creating a "nuclear missile shield" were laid the foundations for new directions in mathematics — computational mathematics and mathematical modeling. And in the USSR and the USA simultaneously developed the deterministic and statistical numerical methods. Methods Monte Carlo (MMC) as a tool for direct statistical simulation has been developed in the United States under the Manhattan project to create nuclear weapons. John von Neumann first proposed to use the computers to generate random numbers. In 1949, John von Neumann and Stanislaw Ulam proposed the first algorithm generating pseudo-random values, which was subsequently named MMC and was the basis for the development of the technique of generating pseudo-random numbers using a computer. The development of MMC and the effectiveness of its application always begins with the development of random or pseudo-random numbers, which depends on the class of tasks and the specific structure and architecture of computers. Methods Monte Carlo began to apply on all architectures of computing systems with parallel and distributed computing. Now in the era of superficially dominated by MMC as a result of the simplicity of their implementation. But this simplicity is deceptive. Developed a complex methodological approach on the example of three complicated "big" problems describing spatially inhomogeneous kinetic processes of diffusion, coagulation, and migration of charged particles, systematically discusses the theory of methods and algorithms for MMC and practice implementing them in the format of not just programs, as well as the parallel random number generators, libraries, data processing, control programs, etc., i.e., all the stages of creating a "digital product". For example, probabilistic models for numerical simulation of the kinetic processes of diffusion, coagulation, and migration of charged particles when the ensembles of trajectories or particles contain 10 in 7–13 degrees of elements, and demonstrated the potential and effectiveness of the MMC to resolve "big" and "complex" tasks not only for the calculation of particular functionals or estimates, but for the whole phase volume of the task. This is the most important achievement that increases MMC's competitiveness with the deterministic finite-difference and grid methods for parallel simulation.

Keywords: information and mathematical software, kinetic processes, Monte Carlo method, distributed parallel computing.

References

1. 4 oktjabrja 1957 goda nachalo kosmicheskoj jery. Pervaja kosmicheskaja [October 4, 1957 the beginning of the space age. The first space. Collection of articles dedicated to the fiftieth anniversary of the launch of the First artificial Earth sputnik]. Moscow, SRI RAS, OOO "Region Invest" , 2007. 169 p.

2. Prikladnaja nebesnaja mehanika i upravlenie dvizheniem [Applied Celestial Mechanics and Motion Control. Collection of papers dedicated to the 90th anniversary of the birth of D.E. Okhotsimsky]. Moscow, KIAM RAS, 2010. 368 p. URL: http://keldysh.ru/memory/okhotsimsky/index.htm

3. Begieva–Kuchmezova R. Svet zvezdy i svechi... K 90-letiju Timura Magometovicha Jeneeva [Light of a star and a candle ... To the 90th anniversary of Timur Magometovich Eneev]. Moscow, KIAM RAS, 2015. 192 p.

4. Keldysh M.V. Tvorcheskii portret po vospominaniyam sovremennikov [Creative portrait on the memoirs of contemporaries]. Moscow, Nauka, 2001. 416 p.

5. Mstislav Vsevolodovich Keldysh. 100 let so dnja rozhdenija [Mstislav Vsevolodovich Keldysh. 100th Birthday Anniversary]. Yaroslavl, Publishing OOO RMP, 2011. 344 p.

6. Mstislav Keldysh [Mstislav Keldysh. The series "GREAT MINDS of Russia" under the editorship of V.S.Gubarev]. Moscow, Publishing house "Komsomolskaya Pravda" , 2016. Issue 2. 96 p.

7. Informacionnaja sistema "Arhivy Rossijskoj akademii nauk" (ISARAN): Fond M.V. Keldysha (Nauchnye trudy i materialy k nim, biograficheskie dokumenty, dokumenty po dejatel'nosti, perepiska, trudy i materialy drugih lic) [Information system "Archives of the Russian Academy of Sciences" (ISARAN): M.V. Keldysh Foundation (Scientific works and materials to them, biographical documents, activity documents, correspondence, works and materials of other persons)]. (accessed 12.04.2017) URL: http://isaran.ru/?q=ru/opis-guid=31F9162F-4408-4E75-A1B2-A76BF7C46345-ida=48 (in Russian)

8. Tihonov A.N. Sobranie nauchnyh trudov. Tom 2. Matematika: Vychislitel'naja matematika. 1956–1979. Matematicheskaja fizika. 1933–1948. [Collection of scientific works. Vol. 2. Mathematics: Computational Mathematics. 1956–1979. Mathematical physics. 1933–1948. Editor and compiler T.A. Sushkevich, A.V. Gulin]. Moscow, Nauka, 2009. 590 p.

9. Kuznetsov E.S. Izbrannye nauchnye trudy (v svyazi so 100-letiem so dnya rozhdeniya). Otvet. redaktor i sostavitel' Sushkevich T.A. [Selected scientific papers (in connection with the 100th anniversary of his birth). Editor and compiler Sushkevich T.A.]. Moscow, FIZMATLIT, 2003. 784 p.

10. Vladimirov V.S. Matematicheskie zadachi odnoskorostnoj teorii perenosa chastic [Mathematical problems of the one-velocity theory of particle transfer].Trudy MIAN im. V.A. Steklov. Vol. LXI (61). Moscow, Publishing of Academy of Sciences of USSR, 1961. 158 p.

11. Marchuk G.I. Chislennye metody rascheta jadernyh reaktorov [Numerical methods for calculating nuclear reactors]. Moscow, Atomizdat, 1958. 381 p.

12. Chentsov N.N. Izbrannye trudy. Matematika [Selected works. Mathematics]. Moscow, FIZMATLIT, 2001. 400 p.

13. Ermakov S.M., Mihajlov G.A. Statisticheskoe modelirovanie [Statistical modeling]. Moscow, FIZMATLIT, 1982. 296 p.

14. Marchuk G.I., Mihajlov G.A., Nazaraliev M.A., Darbinjan R.A. Reshenie prjamyh i nekotoryh obratnyh zadach atmosfernoj optiki metodom Monte-Karlo [The solution of some direct and inverse problems of atmospheric optics by Monte Carlo method]. Novosibirsk, Nauka, 1968. 100 p.

15. Metod Monte-Karlo v atmosfernoj optike. Pod red. G.I. Marchuka [Monte-Carlo method in atmospheric optics. Editor G.I. Marchuk]. Novosibirsk, Nauka, 1976. 283 p.

16. Buslenko N.P., Golenko D.I., Sobol' I.M., Sragovich V.G., Shrejder Ju.A. Metod statisticheskih ispytanij (metod Monte-Karlo) [The method of statistical tests (Monte Carlo method)]. Moscow, GIFML, 1962. 334 p.

17. Sobol' I.M. Metod Monte-Karlo. Populjarnye lekcii po matematike [The Monte Carlo method. Popular lectures on mathematics]. Moscow, Nauka, 1968. 64 p.

18. Sobol' I.M. Chislennye metody Monte-Karlo [Numerical Monte Carlo methods]. Moscow, FIZMATLIT, 1973. 312 p.

19. Nicholas Metropolis, Stanislaw Ulam. The Monte Carlo method // J. Amer. statistical assoc. 1949. Vol. 44, № 247. P. 335-341.

20. Albert G.E. A general theory of stochastic estimates of the Neumann series for the solution of certain Fredholm integral equations and related series // Sympos. on Monte Carlo Methods, ed. H.A.Meyer, Wiley. 1956. P. 37–46.

21. Chavchanidze V.V. Metod sluchajnyh ispytanij (metod Monte-Karlo). Trudy Instituta fiziki AN Gruzinskoj SSR [Method of random testing (Monte Carlo method). Proceedings of Institute of physics, Academy of Sciences of the Georgian SSR]. 1955. Vol. 3. P. 105. (in Russian)

22. Chavchanidze V.V. The application of the random test method to the calculation of the intranuclear cascade. Izvestija AN SSSR, serija fizicheskaja [Izvestija of Academy of Sciences of the USSR. Physical series]. 1955. Vol. 19, № 6. P. 629–638. (in Russian)

23. Shrejder Ju.A. Method of statistical samples (Monte-Carlo method) and its use in digital computers. Priborostroenie [Instrument engineering]. 1955, № 7, P. 1–5. (in Russian)

24. Vladimirov V.S. On the application of the Monte Carlo method for finding the smallest characteristic number and the corresponding eigenfunction of the linear integral equation. Teorija verojatnostej i ee primenenija [Theory of probability and its applications]. 1956, Vol. 1, № 1. P. 113–130. (in Russian)

25. Voevodin V.V. Nekotorye mashinnye aspekty rasparallelivanija vychislenij [Some machine aspects of parallelization]. Moscow, VINITI (Preprint № 22), 1981. 10 p.

26. Voevodin V.V., Voevodin Vl.V. Parallel'nye vychislenija [Parallel computing]. SPb: BHV-Peterburg, 2002. 608 p.

27. Voevodin V.V. Vychislitel'naja matematika i struktura algoritmov. Serija "Superkomp'juternoe obrazovanie" [Computational mathematics and algorithms. Series: "Supercomputing education")]. Moscow, Publising of M.V.Lomonosov Moscow State University, 2010. 168 p.

28. Jakobovskij M.V. Vvedenie v parallel'nye metody reshenija zadach. Serija "Superkomp'juternoe obrazovanie" [Introduction to parallel methods for solving problems. Series: "Supercomputing education")]. Moscow, Publishing of M.V.Lomonosov Moscow State University, 2013. 328 p.

29. Sushkevich T.A., Strelkov S.A., Ioltuhovskij A.A. Metod harakteristik v zadachah atmosfernoj optiki [The method of characteristics in problems of atmospheric optics]. Moscow, Nauka, 1990. 296 p.

30. Sushkevich T.A. Matematicheskie modeli perenosa izlucheniya [Mathematical models of radiation transfer]. Moscow, Binom. Laboratory of Knowledge, 2005. 661 p.

31. Sushkevich T.A., Kozoderov V.V., Kondranin T.V., Strelkov S.A., Dmitriev E.V., Maksakova S.V. Parallel computations in problems of space environmental monitoring and hyperspectral remote sensing. Nauchnyj servis v seti Internet: poisk novyh reshenij: Trudy mezhdunarodnoj superkomp'juternoj konferencii, (Novorossijsk, 17–22 sentjabrja 2012) [Scientific Service in the Internet: the Search for New Solutions: Proceedings of the International Supercomputing Conference (Novorossiysk, Russia, September, 17–22, 2012)]. Moscow, Publishing of M.V.Lomonosov Moscow State University, 2012. P. 320–324. (in Russian)

32. Sushkevich T.A., Strelkov S.A., Maksakova S.V. Information and mathematical software for the aerospace systems of remote sensing and the radiation forcing on the Earth's climate to predict the consequences of development of the Arctic region and computing. Superkomp'juternye Dni v Rossii: Trudy mezhdunarodnoj konferencii (Moscow, 28-29 sentjabr') [Supercomputer Days in Russia: Proceedings of the International Conference (Moscow, Russia, September, 28-29, 2015)]. Moscow, Publishing of M.V.Lomonosov Moscow State Univer-

sity, 2015. P. 163–169. (in Russian)

33. Ermakov S.M., Sipin A.S. Metod Monte-Karlo i parametricheskaja razdelimost' algoritmov [The Monte Carlo method and the parametric separability of algorithms]. Saint Petersburg, Publishing of St. Petersburg University, 2014. 248 p.

34.Artem'ev S.S., Marchenko M.A., Korneev V.D., Jakunin M.A., Ivanov A.A., Smirnov D.D. Analiz stohasticheskih kolebanij metodom Monte-Karlo na superkomp'juterah [Analysis of stochastic oscillations by the Monte Carlo method on supercomputers]. Novosibirsk, Publishing of SB RAS, 2016. 294 p.

35. Marchenko M.M. Chislennoe statisticheskoe modelirovanie kineticheskih processov diffuzii, koaguljacii i perenosa zarjazhennyh chastic s ispol'zovaniem raspredeljonnyh vychislenij. Dissert. doktor. fiz-mat. nauk [Numerical statistical modeling of the kinetic processes of diffusion, coagulation and transport of charged particles using distributed computations. Dissert. doktor. fiz-mat. nauk]. Novosibirsk, ICMMG SB RAN, 2017. 281 p. https://icmmg.nsc.ru/ru/content/marchenko-mihail-aleksandrovich-0

36. The Marsaglia Random Number CDROM including the Diehard Battery of Tests of Randomness. http://stat.fsu.edu/pub/diehard/ 31.08.2016.

37. Knut D.E. Iskusstvo programmirovanija. T. 2. Poluchislennye algoritmy. Perevod s angl. 3-e izdanie [The Art of Computer Programming. Vol. 2. Seminumerical Algorithms. (The translation from English. 3rd Edition)]. Moscow, Williams, 2001. 832 p.

38. Barash L.Ju., Shhur L.N. Generacija sluchajnyh chisel i parallel'nyh potokov sluchajnyh chisel dlja raschetov Monte-Karlo. Modelirovanie i analiz informacionnyh system [Modeling and analysis of information systems]. 2012, Vol. 19, № 2. P. 145–161. (in Russian)

39. Barash L.Y., Shchur L.N. Program library for random number generation. More generators, parallel streams of random numbers and Fortran compatibility // Computer Physics Communications. 2013. Vol. 184. P. 2367–2369.