

**Отчет по этапам НИР, завершенным в 2010 г.
в соответствии с планом НИР института**

Проект НИР 1.3.2. «Параллельные и распределенные вычисления в задачах математического моделирования»

Проект НИР 1.3.2.1. «Параллельные и Грид-технологии реализации задач математического моделирования на супер-ЭВМ» (№ госрегистрации 01200712223).

Научный руководитель – д.т.н. В.Э. Малышкин.

Блок 1. Алгоритмы и средства конструирования параллельных программ численного моделирования. Разработка наукоемких программных систем.

Руководитель – д.т.н. В.Э. Малышкин.

Этап 1.1. Разработка программного обеспечения для организации сетевых взаимодействий. (2010 г.).

Исследования и экспериментальная разработка перспективных систем параллельного программирования и приложений, основанных на структурном методе автоматического конструирования параллельных программ, находится в русле мировых тенденций, обусловленных все более широким распространением параллельных вычислителей, их применением в науке и производстве. Разработки направлены на уменьшение трудоемкости разработки параллельных программ, на решение задачи создания систем параллельного программирования высокого уровня для разных приложений.

1.1.1. Разработка интерфейса для NumGRID систем.

Разработана интерфейсная подсистема для комплекса системного программного обеспечения NumGRID, позволяющая в едином стиле и в рамках единого командного языка формировать задания для различных кластеров, включенных в пул оборудования NumGRID. Использование интерфейсной подсистемы позволяет не изучать все особенности и ограничения интерфейсных подсистем разных кластеров как формировать задания, так и отправлять их на счет и отслеживать ход их исполнения.

Пользователь NumGRID, действуя со своего рабочего компьютера с помощью терминалов, реализующих протокол SSH, загружает на кластеры, входящие в объединение, код программ, собирает программы на каждом из кластеров, запускает шлюзы, запускает свою задачу, отслеживает завершение задачи, сохраняет результаты. Графический пользовательский интерфейс NumGRID сосредоточивает все средства управления в рамках одного клиентского приложения, позволяя автоматизировать указанные выше действия, сохранять параметры объединения кластеров и запуска задач и повторно использовать сохраненные параметры для последующих запусков.

1.1.2. Разработка MPI библиотеки для NumGRID систем.

Разработаны алгоритмы пакетированной передачи сообщений на уровне реализации MPI в NumGRID для реализации библиотечных MPI подпрограмм. Разработаны алгоритмы маршрутизации сообщений с учетом топологии сети связи между объединяемыми кластерами. Разработаны алгоритмы, позволяющие отправлять сообщения, предназначенные нескольким адресатам, одним экземпляром до места разветвления сети. Разработаны алгоритмы реализации неблокирующих коммуникационных функций MPI в NumGRID. Перечисленные алгоритмы реализованы в прототипе системы NumGRID. Разработаны алгоритмы и реализованы библиотечные функции поддержки абстракции коммуникатора по стандарту MPI-1.1. Разработаны алгоритмы для реализации в NumGRID операций коллективного взаимодействия по стандарту MPI-1.1.

Проведены эксперименты по объединению кластеров Сибирского суперкомпьютерного центра СО РАН и Новосибирского государственного университета на примере комплекса программ М.А. Марченко (ИВМиМГ СО РАН) для численного моделирования физических явлений методом Монте-Карло и программы С.Е. Киреева (ИВМиМГ СО РАН) для решения волнового уравнения с помощью двухслойной явной схемы. Показано, что в зависимости от способа распределения вычислений между кластерами меняется эффективность работы приложений. Показано, что использование дополнительных процессоров из другого кластера позволяет уменьшать время выполнения приложения при определенных конфигурациях запуска. В частности, на задаче решения волнового уравнения достигается эффективность 90% на 40 процессорных ядрах относительно производительности программы на 8 ядрах, и 65% на 96 ядрах. На задаче генерации случайных чисел достигается эффективность 92% на 24 ядрах и 109% на 88 ядрах.

Блок 2. Алгоритмы и средства конструирования параллельных программ численного моделирования. Разработка наукоемких программных систем.
Руководитель – к.т.н. С.В. Пискунов.

Этап 2.1. Разработка программного обеспечения для организации сетевых взаимодействий (2010 г.).

2.1.1. Разработка на основе онтологий технологии автоматизированной сборки визуализированного рабочего места пользователя, обеспечивающего взаимодействие с ресурсами ССКЦ.

Разработка средств автоматизированной сборки рабочих мест пользователей сетевой информационно-вычислительной системы (ИВС) базируется на сборочной технологии построения пользовательских интерфейсов. Фундамент технологии составляют три варианта и их комбинации построения внешних модулей. Первый вариант полностью основан на библиотеке ядра ИВС и ее языке сборки. Модули, строящиеся на основе библиотеки ядра, представлены динамически компокуемыми библиотеками, написанными на Си/Си++. Второй вариант - присоединение к ИВС заемных модулей (форум, Jabber сервер, Wiki и др.). При этом правка исходных текстов заемных модулей не требуется. Разработчики ИВС реализовали несколько вариантов модуля стыковки и включили их в ядро. Третий вариант базируется на моделиориентированном подходе к построению приложений; его суть состоит в следующем: строится высокоуровневое описание интерфейса - его модель на языке описания онтологий, а затем по ней генерируется программный код с использованием технологии сборки.

Генерацию кода осуществляет программный модуль, получающий на вход обе онтологии на языке RDF/RDFS. Результат работы программного модуля - текст на языке сборки или на языке разметки. Выполнены две реализации генератора кода. Одна построена как внешний модуль на базе библиотеки ядра ИВС, другая - на базе Perl и HTML.

Рабочие места пользователей ИВС строятся на основе шаблонов в зависимости от выбранной роли участника инновационной деятельности. Использование моделиориентированного подхода означает, что пользователь, основываясь только на онтологиях, получает возможность специфицировать свое рабочее место, включающее рабочий стол, панели вызова операций, подокна просмотра объектов и их каталогов в различных режимах, подокна, позволяющие организовать взаимодействие с ресурсами Центра по высокопроизводительным вычислениям (ССКЦ СО РАН). Построенный по онтологии доступа к ресурсам ССКЦ Web-интерфейс содержит подокна: а) загрузки архива с исходными кодами программы моделирования, б) компиляции загруженной программы моделирования, в) просмотра списка загруженных и скомпилированных

программ моделирования, г) создания модели, д) просмотра списка моделей, е) создания задания с указанием количества требуемых процессоров, шаблона имен выходных файлов и ключей запуска программы, ж) просмотра состояния заданий, з) просмотра результатов моделирования с возможностью обсуждения и загрузки выходного файла.

2.1.2. Разработка библиотеки имитационных моделей информационных и физических процессов и размещение их на сайте winalt.sccc.ru.

Выполнялась разработка библиотеки имитационных моделей информационных и физических процессов. Назначение библиотеки – предоставить модели в качестве прототипов для построения собственных моделей заинтересованным пользователем. Предложен рубрикатор, содержащий разделы: классические клеточные автоматы, арифметические устройства, искусственная жизнь, ассоциативные структуры, клеточные нейронные сети, однородные структуры, многослойные конвейеры, физические модели, другие модели. Этот рубрикатор используется для представления моделей на сайте <http://winalt.sccc.ru/>. Это представление стандартизовано. Оно разделено на разделы, перемещение между которыми осуществляется с помощью навигации. Типичное описание содержит три раздела: описание теоретического основания для построения модели (как правило, мелкозернистого алгоритма), собственно описанию модели, обязательно включающее описание всех объектов данных модели, описание функционирования модели, и, наконец, раздел «скачать модель», позволяющий пользователю перенести WinALT-проект модели на свой компьютер и запустить модель в работу, если на его компьютере установлена система имитационного моделирования мелкозернистых алгоритмов и структур WinALT. Программная реализация библиотеки выполнена с использованием собственных средств системы WinALT и средств генерации и управления контентом. Имитационная модель в компьютере состоит из описания на языке HTML и архива файлов с исходными текстами моделирующих программ, графических объектов модели и полотен для их показа.

Построена версия языка STAR, позволяющая решать задачи на графах, в которых могут изменяться веса ребер. Построен ассоциативный алгоритм для нахождения вторых кратчайших путей от выделенной вершины до всех остальных вершин ориентированного взвешенного графа. Показано, что алгоритм выполняется на STAR-машине с трудоемкостью $O(r \log n)$, где r – число дуг исходного графа, которые не принадлежат дереву кратчайших путей с корнем в выделенной вершине, n – число вершин исходного графа.

Блок 3. Разработка клеточной технологии моделирования физических и информационных процессов с использованием супер-ЭВМ.

Руководитель – к.т.н. С.В. Пискунов.

Этап 3.1. Разработка и исследование мелкозернистых моделей пространственной динамики (2010 г.).

Основным резервом повышения производительности вычислительных устройств является увеличение степени распараллеливания процессов обработки информации вплоть до элементарных операций (уровень мелкозернистого параллелизма). В связи с этим актуальным является разработка и исследование методов и средств мелкозернистого параллелизма в математическом моделировании нелинейных динамических систем и создание средств построения, анализа и оптимизации мелкозернистых алгоритмов для числовой и нечисловой обработки информации, а также накопления мелкозернистых моделей для композиционных построений более сложных моделей.

3.1.1. Разработка клеточно-автоматных моделей многофазных потоков жидкости, в том числе модели струи порошковой смеси.

Разработана клеточно-автоматная модель процесса образования кумулятивной струи из порошковой смеси с учетом химических реакций между частицами порошка. Предложен метод оптимизации процедуры построения правил переходов для многочастичной модели газа струи. Разработаны программы визуализации струи для частиц каждого вещества. Достигнуто качественное соответствие модели физического явления.

3.1.2. Разработка асинхронных клеточно-автоматных моделей для исследования физико-химических процессов на микро- и нано- уровнях (реакции на катализаторах, образование твердых покрытий).

Разработаны две клеточно-автоматные модели гетерогенных каталитических реакций окисления монооксида углерода:

- 1) на поверхности палладия,
- 2) на частицах палладия, нанесенных на металлическую подложку.

Для обоих случаев разработаны параллельные реализации. Для первого случая параллельные реализации на 128 процессорах позволили получить бифуркационную диаграмму реакции. Для второго случая были проведены сравнительные исследования известных и оригинальных методов распараллеливания асинхронного клеточного автомата на многопроцессорных системах с разной архитектурой.

На основе разработанной в 2009 году вероятностной асинхронной клеточно-автоматной модели процесса формирования покрытия на мишени при обработке ее кумулятивной струей проведено компьютерное моделирование конкретного случая, когда вольфрамовая мишень обрабатывается струей из углеродистого порошка. Результаты моделирования сравнивались с результатами дифрактограмм, полученных в реальных физических экспериментах в Институте гидродинамики СО РАН.