

**Отчет по этапам НИР, завершённым в 2011 г.
в соответствии с планом НИР института**

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

Проект НИР 1.3.2.1. «Параллельные и Грид-технологии реализации задач математического моделирования на супер-ЭВМ» (№ госрегистрации 01201002444).

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

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

Руководитель – д.т.н. В.Э. Малышкин.

Этап 1.2. Наукоемкие системы параллельного и распределённого программирования (2011 г.).

Разработка языка описания фрагментированных подпрограмм, алгоритмов компиляции и компилятора.

Предыдущая версия языка описания фрагментированных подпрограмм LuNA по результатам опытной эксплуатации была расширена в трёх направлениях.

- 1) Доработана и реализована возможность описывать множества фрагментов данных и вычислений, а также других языковых конструкций, оперирующих с множествами объектов, в виде индексированных конструкций.
- 2) Расширена спецификация языка LuNA путем добавлением индексированных констант, являющихся параметрами программы.
- 3) Доработаны методы проверки фрагментированных программ на наличие семантических ошибок в компиляторе языка LuNA.

Разработка run-time системы для параллельного исполнения численных параллельных подпрограмм.

Выполнены следующие оптимизации.

- 1) Проведены оптимизации программного кода исполнительной системы. В настоящее время, по результатам тестирования исполнительной системы на ряде матрично-векторных операций, для разумных параметров этих задач доля накладных расходов не превышает 10–20% в сравнении с реализациями тех же программ квалифицированными программистами, выполненных вручную с использованием MPI.
- 2) Разработан и реализован модуль профилирования исполнения фрагментированных программ. Модуль профилирования вырабатывает информацию, которая служит основой для проведения тех или иных оптимизаций в исполнительной системе, в частности, для автоматической генерации рекомендаций.

Разработка набора широко используемых параллельных численных подпрограмм.

- 1) Выполнена фрагментация алгоритма решения системы двумерных уравнений газовой динамики в эйлеровых координатах. Задача решается явным методом на равномерной прямоугольной сетке. Фрагментация алгоритма решения выполнялась путем декомпозиции пространства моделирования. Фрагментированная программа реализована в системе фрагментированного программирования LuNA. Программа обладает следующими динамическими свойствами: настройкой на ресурсы, динамической балансировкой загрузки, выполнением обменов на фоне счета.
- 2) Выполнена фрагментация алгоритма моделирования динамики самогравитирующего пылевого облака методом частиц-в-ячейках. Разработан

фрагментированный алгоритм, который при наличии необходимой системной поддержки (система LuNA) позволяет создавать параллельные программы, реализующие метод частиц-в-ячейках, со всеми необходимыми динамическими свойствами без явного программирования взаимодействия параллельных процессов.

Раздел 2. «Разработка клеточной технологии моделирования физических и информационных процессов с использованием супер-ЭВМ».

Руководитель – к.т.н. С.В. Пискунов.

Разработан алгоритм параллельной реализации асинхронных клеточных автоматов на мультипроцессорах с общей памятью. Тестирование алгоритма производилось на 32-ядерном компьютере 4×Intel Xeon X7560. Размер клеточной области варьировался от 100×100 до 8000×8000 клеток. Работа с потоками поддерживалась библиотекой POSIX Threads. Анализ результатов тестирования позволил сделать следующие выводы:

- 1) наблюдаемое при небольших размерах доменов (объектов данных в отдельном ядре) сверхлинейное ускорение объясняется тем, что объем данных домена помещается целиком в кэше;
- 2) включение гипертрэйдinга увеличивает производительность для $p < 32$ и уменьшает ее для $p > 64$;
- 3) эффективность параллельной реализации при размерах доменов, превышающих 200×200, достигает 70%.

Сравнение с другими алгоритмами показало, что предложенный параллельный алгоритм уступает по производительности только методу блочно-синхронного преобразования, который применим не для всех классов асинхронных клеточных автоматов (КА).

Проблема применимости блочно-синхронного преобразования для эффективной реализации наиболее развитого класса асинхронных КА-моделей (КА типа "диффузия-реакция") проверялась на задаче моделирования процесса окисления СО на поверхности платины путем сравнения эволюций асинхронной и блочно-синхронной реализаций. Было проведено несколько сотен экспериментов, в которых вычислялись следующие характеристики: распределение вероятностей, математическое ожидание и дисперсия наблюдаемых величин и периодов их колебаний, а также доверительные интервалы для математического ожидания и дисперсии. Сравнения показали, что среднеквадратичные разности распределений вероятностей всех характеристик для обоих режимов КА (асинхронного и блочно-синхронного) не превосходят 10-4. Это подтверждает целесообразность использования блочно-синхронного метода для параллельных реализаций асинхронных КА, моделирующих гетерогенные реакции на поверхности катализаторов с учетом диффузии.

Предложена архитектура и выполнена реализация основных модулей новой параллельной версии системы WinALT как развитие разработанной ранее параллельной версии, основанной на консольной версии системы WinALT (зарегистрирована в ФАП СО РАН). Основная идея новой версии – обеспечение вычислений на том оборудовании, которое есть в наличии. Оно разнообразно по архитектуре, ОС, протоколам доступа, менеджерам очередей и т.д. Система содержит четыре уровня иерархии. На первом расположен центральный модуль, координирующий работу всей системы, – виртуальная машина. Она обеспечивает исполнение моделей, обращаясь для исполнения требуемых операций к другим модулям. На втором уровне расположены модули, выполняющие диспетчерские функции. Модули третьего уровня: менеджер форматов, менеджер протоколов, менеджер интерфейсов - загружают модули четвертого уровня и используют их функции. Менеджер форматов за счет расширения множества подключаемых модулей обеспечивает поддержку мультиформатности. Реализовано порядка десяти таких модулей

для представления клеточных массивов с разнотипными клетками, с клетками, хранящими целые числа, булевы значения и т.д. Менеджер протоколов аналогичным образом реализует мультипротокольность, обеспечивая унифицированное использование различных протоколов (ssh, http, winalt/p). Набор функций менеджера протоколов, в частности, включает установку связи с узлом, передачу данных, прием данных и удаленный запуск параллельной программы моделирования. Стыковка с различными библиотеками и пакетами (CUDA, ATI Streams, MPI и др.) осуществляется менеджером интерфейсов.

Выполнены предварительные оценки эффективности параллельной версии системы для клеточных автоматов с классическими окрестностями клеток (Неймана, Мура, Марголуса). Получено ускорение в k раз, где k – число машин в кластере из Windows машин, на которых выполняется моделирующая программа.

Построен ассоциативный алгоритм для динамической обработки дерева кратчайших путей после удаления одной дуги из ориентированного взвешенного графа. Используется STAR-машина, которая моделирует работу ассоциативных параллельных систем типа SIMD с вертикальной обработкой информации. Доказана корректность процедуры и оценена ее временная сложность – $O(hk)$, где h – число битов для кодирования длины максимального кратчайшего пути в графе, k – число вершин, для которых вычисляются новые кратчайшие пути после удаления одной дуги из графа.

Выполнялось развитие методов и средств автоматизированного построения интерфейсов для сетевой информационно-вычислительной среды, обеспечивающих пользователей удобным и легко модифицируемым интерфейсом для конструирования и получения характеристик мелкозернистых алгоритмов и структур в самой широкой трактовке термина, а также возможность использования Супер-ЭВМ для построения реалистичных моделей. Построение интерфейсов выполнялось на примере системы имитационного моделирования мелкозернистых алгоритмов и структур WinALT (зарегистрирована в ФАП СО РАН). С использованием сборочной технологии и модели ориентированного подхода к построению интерфейсов были сформированы внешние библиотеки: форматов данных, языковых функций, модельных подпрограмм, режимов отображения. Набор библиотек расширяем, а каждая библиотека пополняется, для этого в системе WinALT разработаны все необходимые программные средства. Назначение библиотек – обеспечить адаптацию системы к особенностям конкретной предметной области пользователя. Библиотека форматов данных снимает ограничения по выбору типа данного представимого клетками объекта данных (клеточного массива). Библиотека языковых функций обеспечивает возможность использования в моделях функций по работе с клеточными объектами (создание, удаление, модификация, изменение размеров), элементами пользовательского интерфейса (построение диалоговых окон и ввод пользователем информации с их использованием), математическими функциями, функциями консольного ввода/вывода, файлового ввода/вывода и рядом других функций. Библиотека модельных подпрограмм обеспечивают включение сервисных функций в моделирующую программу командой препроцессора `include`. Библиотека обеспечивает работу с диалоговыми окнами для пользовательского ввода-вывода: выбор начальной конфигурации имитационной модели, ввод имени объекта, ввод числа шагов исполнения имитационной модели и т.п. Библиотека режимов отображения обеспечивает возможность визуализировать данные в том виде, который привычен пользователю или общепринят в интересующей его прикладной области. Включение в среду пользователя новой параллельной версии системы WinALT обеспечивает возможность построения реалистичных моделей информационных и физических процессов в клеточном пространстве.