

**Отчет по этапам НИР, завершённым в 2013 г.  
в соответствии с планом НИР института**

**Приоритетное направление 1.4.** «Высокопроизводительные вычисления».

**Программа НИР 1.4.1.** «Математическое моделирование с использованием параллельных и распределённых вычислений»

**Программа НИР 1.4.1.1.** «Технологии, языки высокого уровня и средства параллельной реализации задач численного моделирования на пета- и эксафлопсных супер-ЭВМ» (№ госрегистрации 01201370230).

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

Раздел 1. Разработка методов, алгоритмов и средств конструирования параллельных программ численного моделирования для пета- и эксафлопсных суперкомпьютеров.

Руководитель - д.т.н. В.Э. Малышкин.

Этап 1.1. (2013 г.) Исследование фрагментации и эффективной реализации ряда численных алгоритмов на мультипроцессорах и мультикомпьютерах.

Исследование способов эффективной фрагментации численных алгоритмов на примере задач моделирования на структурированных сетках, матрично-векторных алгоритмов и метода «частиц в ячейках».

Фрагментация алгоритма – универсальный метод распараллеливания численных алгоритмов, который в силу универсальности может быть поддержан системой автоматического конструирования программ, реализующих фрагментированные алгоритмы. Наш подход позволяет уменьшить трудоемкость построения параллельных программ и вносит существенный вклад в создание систем параллельного программирования высокого уровня для разных приложений.

Рассмотрены фрагментации алгоритмов библиотеки BLAS и PIC метода, исследовано к каким изменениям программ может приводить фрагментация и как меняются технологические алгоритмы при фрагментации. Неравномерность нагрузки вычислителей в моделях PIC приводит к существенным расширениям технологических алгоритмов. Особенно существенные и сложные изменения коснулись технологических алгоритмов моделирования взрыва и коллапса. Проведенные исследования позволяют спроектировать инструмент для автоматической реализации моделей физических явлений с взрывом и коллапсом.

Модернизация методики фрагментации численных алгоритмов. Для модернизации методики фрагментации численных алгоритмов была разработана форма представления численных алгоритмов, основанная на трех базовых идеях.

- Алгоритм – информационный граф. В основе представления алгоритма лежит двудольный ориентированный бесконтурный граф с вершинами двух видов: переменные единственного присваивания и операции однократного срабатывания. Дуги графа – информационные зависимости между переменными и операциями. Базовая модель представления алгоритма расширена введением условных операций, позволяющих представлять алгоритмы с ветвлениями.
- Компактное массовое представление. Предложено компактное представление алгоритмов с массивами большого размера за счет операторной записи массовых регулярных структур. Параметрами операторов являются описание структуры (N-мерный массив, множество) и описание элемента структуры (переменная, алгоритм).
- Агрегирование объектов алгоритма. Предложены правила агрегирования переменных и операций, сохраняющее представление алгоритма в виде информационного графа. Агрегирование позволяет ввести понятие структур

данных, разделить алгоритм на отдельные модули (поддержка методики разработки алгоритмов «сверху вниз»), а также описать регулярным образом процесс фрагментации алгоритма.

Многие численные алгоритмы могут быть представлены в разработанной форме, например, матрично-векторные операции, симплекс-метод, вычисления на регулярных сетках, метод частиц-в-ячейках, фрагментация которых была выполнена вручную за предыдущие годы работы над проектом.

На основе разработанного представления численных алгоритмов процесс фрагментации описывается как последовательность эквивалентных преобразований этого представления. Используются такие преобразования как агрегирование и перегруппировка элементов массовых регулярных структур, а также преобразование самих регулярных структур, аналогичные известным оптимизационным преобразованиям циклов, использующихся в современных компиляторах. Это позволяет в дальнейшем автоматизировать процесс фрагментации численных алгоритмов, используя, в том числе, известные техники оптимизации последовательных и параллельных программ.

Разработанная форма представления численных алгоритмов допускает наглядное графическое изображение, позволяющее создать на его основе графический язык описания численных алгоритмов и систему визуального фрагментированного программирования.

Выполнение портирования системы фрагментированного программирования LuNA на платформу неоднородного NumGRID (на гибридный кластер ССКЦ).

Система фрагментированного программирования LuNA была установлена на платформу NumGRID для проверки возможности использования средств системы LuNA на неоднородных GRID. Программное обеспечение NumGRID является частичной реализацией стандартов MPI 1.1 и MPI 2.0, поэтому оно может быть использовано в качестве базовой коммуникационной подсистемы для системы LuNA. В частности, были реализованы недостающие функции стандарта MPI в системе NumGRID, необходимые для запуска системы LuNA. Работоспособность связки систем LuNA – NumGRID была проверена на ряде тестовых задач численного моделирования.

Раздел 2. Разработка и исследование клеточно-автоматных моделей нелинейной пространственной динамики с использованием технологии параллельного программирования.

Руководитель - д.т.н. О.Л. Бандман.

Этап 2.1. (2013 г.) Исследование свойств параллельных реализаций асинхронных клеточно-автоматных моделей.

Исследование клеточно-автоматной модели диффузионных процессов.

Асинхронная диффузия исследовалась с точки зрения ее влияния на эффективность параллельной реализации клеточно-автоматной системы, в которую она входит. Это было сделано путем анализа результатов параллельных реализаций двух клеточно-автоматных систем: 1) просачивания жидкости сквозь почву, и 2) моделирования динамики организмов в озере Байкал. В первом случае выяснено, что каждый клеточный автомат (КА) асинхронной диффузии в системе при распараллеливании вычислений на кластере требует выполнения столько же межпроцессных обменов на каждой итерации, сколько клеток содержится в шаблоне соседства локального оператора КА, что уменьшает эффективность параллельной реализации на несколько процентов (в данном случае  $\approx 2\%$ ). Во втором случае клеточно-автоматная система содержала целочисленную диффузию. Реализация системы из 8 КА на компьютере с общей памятью потери эффективности из-за диффузии не выявила. Исследование свойств клеточно-автоматной диффузии и

химических реакций необходимы для построения компьютерных моделей сложных процессов на микро-уровне в химии, биологии и материаловедении.

Определение значений модельных коэффициентов диффузии.

Несмотря на то, что клеточно-автоматные модели диффузии исследовались ранее, выяснилось, что для некоторых моделей безразмерный коэффициент диффузии  $D$  определен неправильно (синхронная клеточно-автоматная диффузия с окрестностью Марголуса) или совсем не определен (целочисленная клеточно-автоматная диффузия). Ревизия и экспериментальная проверка клеточно-автоматных моделей диффузии оказались необходимыми для моделирования сложных процессов, описываемых системами из клеточных автоматов (КА) (процесс увлажнения почвы, динамика организмов в озере Байкал). В результате проведения серии экспериментов подтверждены известные значения для асинхронной «наивной» диффузии и определен коэффициент диффузии для синхронного случая. Была предложена новая клеточно-автоматная модель «целочисленной диффузии». Для неё проделаны тесты, показавшие, что  $D = n/m$ , где  $n$  – целочисленное состояние клетки, а  $m < n$ , число, которым она обменивается с соседней клеткой. Установлена зависимость автоматного шума от  $p_{\max}$  – максимального целого в алфавите КА.

Статистический анализ подобию эволюций асинхронных клеточных автоматов и их блочно-синхронных модификаций для решения задач поверхностной химии.

Выполнен статистический анализ подобию эволюций асинхронных клеточных автоматов с эволюциями их блочно-синхронных модификаций при моделировании гетерогенных реакций на каталитической поверхности. Для численных характеристик процесса, а именно, концентраций адсорбированных газов, скорости реакции, периода колебаний концентраций, вычислялись следующие статистики: математическое ожидание, дисперсия, среднеквадратичное отклонение, которые показали, что различие эволюций лежит в пределах статистической погрешности.