

**Отчет по этапам НИР, завершенным в 2014 г.
в соответствии с планом НИР института**

Приоритетное направление 1.4. «Высокопроизводительные вычисления».

Программа НИР 1.4.1. «Математическое моделирование с использованием параллельных и распределенных 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 2014 г. «Разработка язык высокого уровня для описания поведения и распределения ресурсов прикладной параллельной фрагментированной программы и системных алгоритмов, реализующих это описание».

Разработано расширение языка LuNA (Language for Numerical Algorithms) для описания поведения и распределения ресурсов прикладной параллельной фрагментированной программы. Для управления поведением фрагментированной программы добавлены средства, позволяющие задавать прямое управление на части программы, задавать параметры освобождения ненужной более памяти («сборки мусора»). Для описания распределения ресурсов при выполнении фрагментированной программы добавлены средства, позволяющие представлять соседство фрагментов данных через введение метрики. Разработанные языковые средства позволяют увеличивать эффективность выполнения прикладной параллельной фрагментированной программы по времени и расходу ресурсов. Также эти средства служат основой для автоматической оптимизации фрагментированных программ на основе статического анализа и профилирования. Расширение языка является экспериментальным и покрывает лишь частично потенциальные возможности по описанию желаемого поведения и распределения ресурсов фрагментированной программы. Тема требует дальнейшего развития.

Разработаны системные алгоритмы, поддерживающие новые языковые средства. С ними работают алгоритмы компилятора и исполнительной run-time системы. Для этапа компиляции фрагментированных программ разработаны алгоритмы генерации управляющей подпрограммы прямого управления запуском фрагментов вычислений в двух вариантах – для последовательного случая и на базе управляющей сети Петри. Испытание разработанных алгоритмов показало ускорение выполнения фрагментированных программ (в разы) для ряда тестовых задач, в числе которых решение уравнения Пуассона неявным итерационным волновым методом на трехмерной регулярной решетке.

Для этапа исполнения фрагментированных программ разработаны алгоритмы хранения, поиска и обеспечения доступа к распределенным данным, основанные только на локальных взаимодействиях и реализующие заданное соседство на множестве фрагментов данных. Переработан алгоритм динамической балансировки нагрузки на процессоры таким образом, чтобы он сохранял заданное соседство на множестве фрагментов данных. Разработанные системные алгоритмы учитывают требования неограниченной масштабируемости с целью применения их на пета- и эксафлопсных суперкомпьютерах. Для обеспечения масштабируемости алгоритмы исключают нелокальные коммуникации (между дальними вычислительными узлами с точки зрения

сетевой топологии) и расходуют константное количество ресурсов на каждом вычислительном узле (накладные расходы не зависят от размера вычислителя). Масштабируемость системных алгоритмов не отменяет необходимость в масштабируемости прикладного алгоритма. Если прикладной алгоритм плохо масштабируется (например, содержит нелокальные связи), то и общая масштабируемость системы прикладной алгоритм – исполнительная система также будет неудовлетворительной.

Разработанные алгоритмы реализованы в составе компилятора и исполнительной run-time системы LuNA и заменили соответствующие алгоритмы предыдущей версии системы. Теоретический анализ алгоритмов и тестовые испытания показали качественно требуемую масштабируемость. Тем не менее, требуется дальнейшее усовершенствование алгоритмов и создание новых средств управления поведением фрагментированной программы и распределением ресурсов для достижения высокой производительности системы в целом.

Создана методика разработки программ для неоднородных распределенных вычислительных систем на основе фрагментированного представления алгоритмов. Методика предусматривает применение следующих принципиальных приемов программирования:

- разбиение вычислений на фрагменты в количестве, значительно превышающем число процессорных элементов;
- планирование первоначального распределения вычислительной программы таким образом, чтобы обеспечить минимизацию простоев процессорных элементов из-за ожидания данных от других процессорных элементов; вычислительная нагрузка должна быть пропорциональна производительности процессорных элементов;
- обеспечение динамической балансировки вычислений на основе перемещения блоков вычислений и данных;
- организация асинхронной передачи данных для зависимых от этих данных блоков вычислений на фоне выполнения операций других блоков, для которых данные готовы.

Для разработки параллельных программ в соответствии с этой методикой используется система программирования LuNA. Программист в LuNA задает частичный порядок на множестве вычислительных фрагментов, а также формулирует «рекомендации» о том, как вычислительные фрагменты и фрагменты данных должны быть распределены по вычислительным узлам суперкомпьютера, чтобы обеспечивалось свойство локальности при работе с данными. На основе такого представления алгоритма система LuNA генерирует программу, автоматически обеспечивая коммуникации между узлами вычислительной системы, балансировку вычислительной нагрузки и другие динамические свойства.

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

Руководитель - д.т.н. О.Л. Бандман.

Этап 2014 г. «Разработка и исследование клеточно-автоматных моделей процессов самоорганизации».

Разработаны асинхронные двумерная и трёхмерная версии клеточных автоматов, моделирующих формирование устойчивых структур, которые являются оцифрованным представлением пористых материалов. Для эффективной параллельной реализации трудоёмкого алгоритма моделирования были выполнены преобразования асинхронного клеточного автомата к блочно-синхронному виду и получены сравнительные оценки

совпадения результатов моделирования. Сравнения производились по следующим численным характеристикам: перколяция вдоль трёх плоскостей, число компонент связности, размеры компонент связности, пористость. Для численных характеристик рассчитывались математические ожидания, дисперсии, доверительные интервалы и среднеквадратичные разности. С помощью проведения сравнительного анализа значений статистик, полученных для численных характеристик эволюции для различных размеров блока, установлено, что при увеличении блока, разница между значениями статистик уменьшается, и эволюция блочно-синхронного клеточного автомата сходится к эволюции асинхронного клеточного автомата.

На основе параллельной композиции клеточных автоматов, в которой каждый компонентный клеточного автомата моделировал поведение соответствующего организма, создана модель динамики популяции восьми организмов оз. Байкал. Верификация модели показала хорошее (10%) совпадение результатов моделирования с известными из литературы величинами биомасс моделируемых организмов. Проведено моделирование влияния локального загрязнения на изменение популяции, и найдены критические значения интенсивности загрязнения для сохранения популяций.