

**Отчет по этапам НИР, завершённым в 2015 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» (номер государственной регистрации 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 2015 г. «Разработать библиотеку прикладных фрагментированных параллельных подпрограмм численного моделирования».

Разработаны и реализованы следующие алгоритмы поддержки исполнения фрагментированных программ на мультипроцессорах, мультикомпьютерах и неоднородных мультикомпьютерах в рамках системы фрагментированного программирования LuNA.

- Алгоритм “Rope of beads” распределения данных и вычислений по вычислительным узлам мультикомпьютера. Алгоритм позволяет учитывать структуру данных прикладной программы и осуществляет динамическую балансировку нагрузки на вычислительные узлы при выполнении фрагментированных программ.
- Ряд системных алгоритмов, реализующих событийную модель управления исполнением фрагментированной программы. Эти алгоритмы позволяют осуществлять жесткий контроль и управление исполнением фрагментированной программы и обеспечивать высокую эффективность ее исполнения ценой разработки отдельной управляющей программы. Разработанные алгоритмы предназначены для работы на неоднородных мультипроцессорах и мультикомпьютерах.

Также выполнен ряд технических доработок в системе NumGRID, необходимых для обеспечения функционирования системы LuNA на базе системы NumGRID.

Разработаны и реализованы в виде программных модулей алгоритмы поддержки библиотеки параллельных модулей. Разработанные алгоритмы предназначены для обеспечения возможности запуска библиотечных LuNA-подпрограмм из традиционных прикладных программ, разработанных с использованием MPI. Разработанные алгоритмы позволяют передать в пользование системе фрагментированного программирования распределённые данные прикладной задачи, осуществить запуск библиотечной подпрограммы над этими данными под управлением системы LuNA и после выполнения библиотечной подпрограммы получить её выходные результаты в прикладную программу. Реализован синхронный коллективный режим запуска LuNA-подпрограмм. Доступ к библиотечным LuNA-подпрограммам организован таким же образом, как и доступ к подпрограммам традиционных библиотек. Это означает, что использование системы LuNA инкапсулировано в подсистеме управления библиотечными вызовами и не видно прикладному программисту.

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

Руководитель - д.т.н. О.Л. Бандман.

Этап 2015 г. «Разработка и исследование новых клеточно-автоматных моделей пространственной динамики».

Разработан метод расчета вероятностей применения правил переходов в клеточном автомате, моделирующем распространение акустической волны. Метод основан на анализе уравнений полудетального баланса и законов сохранения массы и импульса. Проведены серии тестовых вычислительных экспериментов, позволившие получить зависимости скорости распространения волны и амплитуды от значений вероятностей в правилах переходов, характеризующих акустические свойства среды.

На основе двумерной клеточно-автоматной модели газового потока разработана целочисленная клеточно-автоматная модель струи из смеси газа и нескольких порошков. Для частиц порошков разных типов обеспечена возможность химических взаимодействий частиц друг с другом. Выполнена параллельная реализация разработанной модели, в которой использованы механизмы начальной и динамической диффузионной балансировки нагрузки.

Проведены компьютерные эксперименты по моделированию высокоскоростной струи, состоящей из газа и смеси порошков, с химическими взаимодействиями между частицами порошков. Исследовано влияние направления движения моделируемой струи в гексагональной структуре клеточного массива на результаты эксперимента. Разработан метод интерпретации результатов, сохраняющий изотропию пространства моделирования.

Кроме того, продолжалась работа по исследованию методов моделирования процессов типа «реакция-диффузия» с помощью стохастических клеточных автоматов. В частности, разработаны модели самоорганизации белков в клетках живых организмов, приводящих к росту и делению клеток.