

Отчет по этапам НИР, завершённым в 2018 г. в соответствии с планом НИР института

Приоритетное направление 1.4. «Высокопроизводительные вычисления»

Проект № 0315-2016-0007 «Технологии, алгоритмы и система автоматического конструирования параллельных программ численного моделирования на пета- и экзафлопсных супер-ЭВМ» (номер государственной регистрации 01201370230).

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

Этап 2018 г. Разработка алгоритмов и реализация подсистемы управления библиотекой фрагментированных подпрограмм. Разработка методологии синтеза стохастических клеточно-автоматных моделей и исследование влияния стохастичности клеточного автомата на производительность моделирования для последовательных и параллельных версий.

Разработана и реализована подсистема управления библиотекой фрагментированных подпрограмм на базе системы LuNA. Библиотека предназначена для накопления библиотечных модулей – фрагментированных подпрограмм – различного вида. На текущий момент поддерживаются следующие виды фрагментированных подпрограмм: программа на языке LuNA, программа для исполнительной системы LuNA-framework и фрагментированная программа на базе MPI (Message Passing Interface). Библиотека предусматривает возможность вызова библиотечных подпрограмм из других подпрограмм унифицированным образом (независимым от типа подпрограммы).

Библиотека фрагментированных подпрограмм включает спецификацию функциональных и нефункциональных свойств модулей (подпрограмм) библиотеки. Подсистема управления библиотекой позволяет хранить модули, включать новые модули в библиотеку, предоставлять информацию о модулях и их свойствах в унифицированном виде. Спецификация функциональных свойств осуществляется путём введения вычислительной модели предметной области. А именно, входные и выходные параметры библиотечной подпрограммы ставятся в соответствие переменным вычислительной модели. Совпадение множеств входных и выходных переменных различных модулей означает их функциональную эквивалентность. Нефункциональные свойства фиксируются в форме расширяемого набора атрибутов модулей и отражают форматы представления входных, выходных и промежуточных величин модулей, потребности в ресурсах и исполнительном окружении модуля, а также другие нефункциональные свойства модулей: оценочная сложность, режимы фрагментации данных, оценочный расход памяти и т.п. В качестве языка спецификации модулей выбран формат текстового представления структурированных данных JSON (JavaScript Object Notation), так как хорошо он инструментально поддержан, ориентирован как на редактирование человеком, так и машиной. Описание библиотечного модуля представляет собой JSON-текст, следующий ряду соглашений об именовании и структуре данных.

Реализована подсистема для включения библиотечных фрагментированных подпрограмм в прикладные программы. Реализована подсистема (библиотека), предоставляющая программисту прикладной программный интерфейс (API), который позволяет в программах, написанных на языке C++, осуществлять запуск библиотечных фрагментированных подпрограмм. Архитектура подсистемы предусматривает возможность расширения реализации для обеспечения запуска фрагментированных подпрограмм и из программ на других языках программирования, позволяющих подключать динамические библиотеки. Программный интерфейс позволяет передавать фрагментированные данные из прикладной программы в библиотечную фрагментированную подпрограмму на вход. Результаты вычислений библиотечной подпрограммы могут быть получены через интерфейс в прикладную программу или переданы на вход другой библиотечной

подпрограммы. Вызов двух и более библиотечных подпрограмм может осуществляться как в синхронном, так и в асинхронном режимах.

В качестве экспериментального примера применения подсистемы для включения библиотечных фрагментированных программ в прикладные программы был разработан скелетон для решения задач пространственной динамики методом частиц-в-ячейках. Скелетон (каркас) – это параметризованная прикладная программа, где параметрами могут выступать функциональные блоки (процедуры). Параметрами скелетона являются: 1) процедуры для выполнения основных этапов расчета, определяющие особенности решаемой задачи и методы, используемые для ее решения (например, вычисление распределения плотности, вычисление распределения сил, действующих на модельные частицы, сдвиг частиц под действием этих сил), 2) расчетные параметры задачи – размеры пространственной сетки, количество модельных частиц, количество временных шагов, 3) физические параметры задачи. В качестве фактических параметров скелетона могут выступать процедуры, имеющие реализации различного вида, например, в виде последовательных подпрограмм, MPI-подпрограмм, LuNA-подпрограмм. На базе скелетона была реализована фрагментированная программа решения задачи моделирования динамики самогравитирующего пылевого облака методом частиц-в-ячейках.

В качестве отдельных библиотечных модулей были реализованы следующие наборы фрагментированных подпрограмм на языках C++ и LuNA: 1) модуль `mesh3d` – подпрограммы для работы с фрагментированными трехмерными массивами (создание, копирование, редукции разного вида), 2) модуль `mesh3d_exchange` (на базе модуля `mesh3d`) – подпрограммы для различных типов обмена граничными значениями фрагментов трехмерного массива (перезапись значений в граничных ячейках, суммирование значений в граничных ячейках, обмен специального вида – обмен частицами между фрагментами фрагментированного по пространству множества частиц) с различными видами трехмерного соседства (6 / 18 / 26 соседей), 3) модуль `mesh3d_log` (на базе модуля `mesh3d`) – подпрограммы вывода в файл или множество файлов трехмерного фрагментированного массива и его двумерных проекций (сечений по заданной координате или результатов редукции по одной из осей), 4) модуль `poisson3d` (на базе модулей `mesh3d` и `mesh3d_exchange`) – подпрограммы для решения уравнения Пуассона методом Якоби на трехмерной фрагментированной сетке. Создание подпрограмм модуля `mesh3d_exchange` было автоматизировано с помощью специального генератора LuNA-программ на языке Python. Подпрограммы из всех перечисленных модулей использовались в качестве компонентов разработанного скелетона.

Разработан распределенный алгоритм распределения данных и динамической балансировки нагрузки Patch. Алгоритм интегрирован в систему фрагментированного программирования LuNA. Проведено тестирование алгоритма на фрагментированных реализациях вычислительных задач. Для тестирования использовался кластер МВС-10П МСЦ РАН.

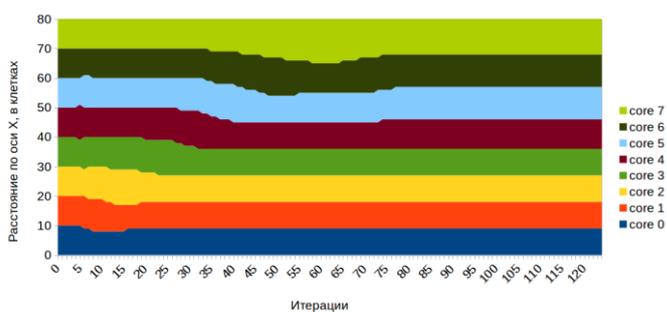
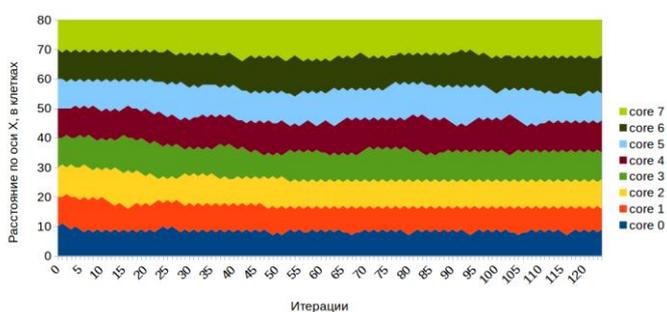
Исследовался фактор анизотропии, вносимой гексагональной структурой клеточного массива дискретной модели газопорошкового потока с целочисленным алфавитом и гексагональной структурой соседства на этапе вычисления осредненных значений давления и скорости потока. Сформулирован метод осреднения для получения изотропных полей скорости и давления с произвольным углом наклона к координатным осям. Проведены вычислительные эксперименты с помощью специализированного программного комплекса на вычислительном кластере. Проведенные исследования относятся к этапу постобработки, заключающемуся в преобразовании дискретных значений концентрации модельных частиц, находящихся в клетках с дискретными координатами, в непрерывные значения давления газа в любых заданных точках плоскости, а дискретных значений скорости этих частиц — в непрерывные значения проекций скорости потока на координатные оси. Показано, что необходимость перехода к непрерывным координатам обусловлена невозможностью

размещения на гексагональной структуре окрестностей осреднения с одинаковым шагом вдоль обеих координатных осей и, тем более, под углом к осям, так чтобы центр каждой из окрестностей совпадал с центром какого-либо гексагона.

Разработаны методы осреднения клеточно-автоматных моделей газовых потоков. Исследована возможность применения симметричных окрестностей осреднения, с центром в некоторой клетке массива, и окрестностей с произвольным центром. Показано, что метод, использующий окрестности осреднения с произвольным центром, позволяет строить поле скорости потока и поле давления газа с произвольным шагом и под произвольным углом к координатным осям без дефектов аппроксимации, присущих методу, использующему симметричные окрестности осреднения. Разработанные методы корректно работают с гексагональными клеточными массивами, выдавая результат в виде традиционно используемой квадратной решетки.

Исследована эффективность разработанных методов реализации клеточно-автоматных моделей газовых потоков на суперкомпьютерах. Проведены вычислительные эксперименты, подтвердившие тезис о том, что при использовании разностного метода динамической балансировки в процессе моделирования не возникает автоволнового эффекта перераспределения нагрузки в широком диапазоне размеров долей клеточного массива, распределяемых по ядрам суперкомпьютера. Установлено, что на исследуемом классе задач эффективность параллельной реализации у разностного метода выше на 10-15%, чем у метода с отношением времен выполнения.

Исследованы особенности параллельных реализаций дискретной стохастической модели, имитирующей просачивание жидкости через почву, имеющую сложную пористую микроструктуру. С помощью моделирования показан процесс движения жидкости по извилинам пор и заполнение каверн и колодцев. Была использована дискретная стохастическая модель этого процесса, представляющая собой стохастический клеточный автомат, функционирование которого задается набором элементарных локальных операторов, действующих в дискретном клеточном пространстве и имитирующих перемещения (диффузия, конвекция, адсорбция) и преобразования (реакция, фазовое превращение) абстрактных или реальных частиц. Вычисления проводились на суперкомпьютерах, т.к. микроуровень представления процесса требует больших размеров клеточных пространств. Для получения приемлемой эффективности параллельной реализации была внесена детерминированность в алгоритм вычисления, т.е. произведено снижение стохастичности модели. Проведена серия вычислительных экспериментов, позволивших оценить достоинства и недостатки возможных способов реализации



стохастической дискретной модели процесса просачивания жидкости в пористую среду со сложной морфологией на многопроцессорном кластере.

На рисунке изображена динамика распределения клеточного массива между восемью ядрами. На верхней диаграмме в качестве порогового значения для перебалансировки использовалось отношение времен выполнения одной итерации соседними ядрами, на нижней диаграмме – разность этих времен.

В первом случае устойчивые автоволны образовались, когда значение порогового значения было 0.99 и выше. Во втором случае автоволны не

образуются, если пороговое время выбрано в полтора и более раз большим среднего времени обработки одного столбца клеточного массива. Исследования проводились для клеточно-автоматной модели газового потока с гексагональной структурой клеточного массива и целочисленным алфавитом состояний клеток.

Исследовано влияние вероятностей столкновения частиц в клетках 2D решетки плотностью три в недетерминированных клеточных автоматах, моделирующих волновые процессы. Для моделирования волнового процесса используется класс одночастичных 2D «решеточных» клеточных автоматов HPP1rp (rest particles). Узел решетки (клетка) имеет четырех соседей. В каждый момент времени в клетке может находиться не более одной движущейся частицы с единичной массой и единичной скоростью, направленной в сторону соседнего узла (принцип Паули), и одна частица покоя с массой 2 и нулевой скоростью. Состояние каждой клетки однозначно определяется булевым вектором длиной 5.

Клетки автомата HPP1rp вычисляют новое состояние синхронно, в результате чего происходит изменение глобального состояния автомата. Известно, что если матрица столкновений удовлетворяет условию полудетального баланса, то автомат HPP1rp моделирует волновой процесс.

Разработан метод построения правил перехода недетерминированного двумерного клеточного автомата с четырьмя соседями, моделирующего волновой процесс. Правила перехода сконструированы на основе матрицы вероятностей, гарантирующей сохранение общей массы и общего импульса частиц в каждой клетке массива. Исследовано влияние вероятностей столкновения частиц на параметры образующейся волны. Метод позволяет получить клеточно-автоматную модель волны с различными параметрами для случая с единичным импульсом и массой частиц, равной трем.

Для решения задач на графах используется модель параллельных систем типа SIMD, называемая STAR-машиной, которая обрабатывает информацию по содержимому памяти. Функционирование этой модели задается группой основных операций для выполнения ассоциативной обработки, а для разработки ассоциативных алгоритмов построена библиотека стандартных процедур. Для выполнения ассоциативных алгоритмов на графических ускорителях с помощью технологии CUDA были реализованы операции STAR-машины и библиотека стандартных процедур.

Разработан ассоциативный параллельный алгоритм для динамической обработки дерева кратчайших путей после добавления новой дуги к ориентированному графу. Для этого используется модификация алгоритма Дейкстры для нахождения кратчайших путей, которая одновременно строит дерево кратчайших путей и кратчайшие расстояния от корня до любой вершины. Доказана корректность этого алгоритма и приведена оценка сложности.

Выделены конструкции ассоциативного алгоритма, с помощью которых выполняется динамическая обработка множества кратчайших расстояний между любыми парами вершин ориентированного графа после удаления одной дуги.

Проведен анализ существующих форматов входных/выходных данных для тестовых графов, содержащих более 5000 вершин. На его основании были выбраны два формата *.gr (используется в генераторе R-MAT графов GraphHPC-1.0, синтетические графы, моделирующие графы социальных сетей и интернета) и Autonomus System (графы протоколов интернета).

В реализацию STAR-машины на GPU был добавлен модуль с процедурами ввода/вывода данных в выбранных форматах с переводом в любой из внутренних форматов STAR-машины (матрица смежности, матрица весов или список дуг).

Проведен численный эксперимент на R-MAT графах по сравнению времени работы ассоциативного параллельного алгоритма для динамической обработки дерева кратчайших путей после добавления новой дуги к ориентированному графу с временем работы статической ассоциативной параллельной модификацией алгоритма Дейкстры.