**Выбор оптимального количества
процессорных ядер для алгоритма
многократной маркировки перколяционных
кластеров на высокопроизводительных
вычислительных системах**

С. Ю. Лапшина

МСЦ РАН

Аннотация. В статье рассматривается выбор оптимального количества запрашиваемых процессорных ядер для запуска алгоритма многократной маркировки перколяционных кластеров на современных суперкомпьютерных системах, установленных в Межведомственном суперкомпьютерном центре Российской академии наук.

Алгоритм может быть использован в любой области в качестве инструмента дифференцирования кластеров решетки большого размера, т. к. ему на вход подаются данные в формате, независимом от приложения. В МСЦ РАН этот инструмент был использован для изучения задачи распространения эпидемий, для чего была разработана соответствующая мультиагентная модель.

В ходе имитационных экспериментов применялся усовершенствованный для применения на многопроцессорной системе вариант алгоритма многократной маркировки перколяционных кластеров Хошена — Копельмана, связанный с механизмом линковки меток, который также может быть использован в любой области в качестве инструмента дифференцирования кластеров решетки большого размера.

Ключевые слова: мультиагентное моделирование, перколяционный кластер, механизм линковки меток, высокопроизводительные вычислительные системы, процессорные ядра.

The Optimal Processor Cores' Number choice for the Parallel Cluster Multiple Labeling Technique on High-Performance Computing Systems

S. Y. Lapshina

JSCC RAS

Abstract. The article is about the research of a optimum number of processor cores for launching the Parallel Cluster Multiple Labeling Technique on modern supercomputer systems installed in the JSCC RAS.

This technique may be used in any field as a tool for differentiating large lattice clusters, because it is given input in a format independent of the application. At the JSCC RAS, this tool was used to study the problem of the spread of epidemics, for which an appropriate multiagent model was developed.

In the course of imitation experiments, a variant of the Parallel Cluster Multiple Labeling Technique for percolation Hoshen-Kopelman clusters related to the tag linking mechanism, which can also be used in any area as a tool for differentiating large-size lattice clusters, was used to be improved on a multiprocessor system.

Key words: multi-agent simulation, percolation's cluster, parallel cluster multiple labeling technique, high-performance computing systems, processor cores.

Ситуация с распространением нового коронавируса COVID-19 показала, что в настоящее время инфекционные болезни остаются одной из ведущих причин преждевременной смерти людей. 30 января 2020 г. на заседании комитета по чрезвычайным ситуациям Всемирной организации здравоохранения (ВОЗ) вспышка COVID-19 была признана чрезвычайной ситуацией в области общественного здравоохранения, имеющей международное значение. 11 марта ВОЗ объявила эпидемию коронавируса пандемией.

На 14 июля 2020 года подтверждено 12 964 809 случаев заражения по всему миру, 570 288 летальных исходов [1]. В Китае — 85 623 случая, 4 649 летальных исходов. В США — 3 286 063 случая заражения, 134 704 летальных исхода. В Европе большинство случаев пришлось на Российскую Фе-

дерацию — 739 947 случаев заражения, 11 614 летальных исходов; Великобританию — 290 137 случаев заражения, 44 830 летальных исходов; Испанию — 255 953 случаев заражения, 28 406 летальных исходов.

При анализе распространения данной эпидемии (и эпидемий прошлых лет) замечена тенденция, что в определенный момент возникает скачкообразный переход в распространении эпидемии.

При моделировании процессов распространения массовых эпидемий и пандемий часто возникает эффект того, что незначительные изменения значений одного или нескольких параметров (например, вероятности инфицирования отдельных представителей) могут привести к скачкообразному изменению поведения всей популяции (болезнь из локальной и неопасной переходит в стадию широкомасштабной пандемии). Одним из способов исследования подобных эффектов является изучение формирования и роста *перколяционных кластеров*.

Исследования свойств перколяционных кластеров целесообразно сопровождать активным использованием разнообразных технологий компьютерного моделирования, в том числе и технологии мультиагентной имитации [2–4].

Принципиальной особенностью мультиагентной имитации по сравнению с другими технологиями (агрегатной, дискретно-событийной и т. д.) является возможность выявления и регистрации свойств поведения сложной системы под воздействием сугубо индивидуалистического характера поведения её представителей. Уточнение полученных результатов с целью совершенствования исходной модели порой требует проведения большого количества ресурсоёмких имитационных экспериментов (главным образом на многопроцессорных вычислительных архитектурах), использования специализированных алгоритмов распараллеливания и подбора оптимальных значений входных параметров [5].

В мультиагентной модели распространения эпидемий, разработанной в МСЦ РАН как часть программно-аппаратного комплекса BIOCLUST [6], применяется много-

процессорный алгоритм многократной маркировки перколяционных кластеров (ММПК) [7].

Важным моментом работы параллельного алгоритма ММПК является правильный подбор количества процессорных ядер, на которых будет производиться обработка исходной решетки.

В ходе работы алгоритма она загружается в оперативную память узла и, принимая во внимание ее большой размер, было бы логично проводить распараллеливание процесса ее обработки на большое количество частей.

Но с другой стороны в ходе работы алгоритма нужно проводить обмен данными между пограничными ячейками частей исходной решетки. И если таких частей будет слишком много, то время обмена данными может превысить отведенный лимит времени на обработку задания.

Проводя запуск алгоритма на суперкомпьютере, необходимо найти баланс между увеличением количества запрашиваемых вычислительных ядер и задержками, связанными с обменом данными между пограничными ячейками.

Для исследования оптимального количества запрашиваемых процессорных ядер для запуска алгоритма программа маркировки кластеров Load запускалась в МСЦ с входным параметром вероятности p от 0.01 до 1 с шагом в 0.01 при постоянных значениях модельного времени $t = 30$ дней на 48–304 процессорных ядрах на следующих суперкомпьютерах: МВС-10П ОП, МВС-10П МП2, МВС-10П Торнадо, МВС-100К.

МВС-10П ОП предоставляется пользователям Центра в режиме коллективного доступа к трём разделам: Haswell, Broadwell и Skylake:

- Haswell (42 вычислительных модуля на базе процессоров Intel Xeon E5-2697 v3, 128 ГБ оперативной памяти на модуль, пиковая производительность модуля — 1.1648 TFLOPS, 1176 ядер в разделе);

- Broadwell (136 вычислительных модулей на базе процессоров Intel Xeon E5-2697 v4, 128 ГБ оперативной памяти

на модуль, пиковая производительность модуля — 1.3312 TFLOPS, 4352 ядра в разделе);

- Skylake (58 вычислительных модулей на базе процессоров Intel Xeon Gold 6154, 192 ГБ оперативной памяти на модуль, пиковая производительность модуля — 3.456 TFLOPS, 2088 ядер в разделе).

Общим для установок на MBC-10П ОП является использование в качестве коммуникационной среды низколатентной сети Intel Omni-Path.

MBC-10П МП2 KNL — суперкомпьютер из 38 вычислительных модулей на базе процессоров Intel Xeon Phi 7290, 96 ГБ оперативной памяти на модуль, пиковая производительность модуля — 3.456 TFLOPS, 2736 ядер в системе.

MBC-10П Торнадо — суперкомпьютер из 207 вычислительных модулей, каждый модуль имеет в своем составе 2 процессора Xeon E5-2690, 64 ГБ оперативной памяти, два сопроцессора Intel Xeon Phi 7110X, пиковая производительность модуля — 371.2 GFLOPS, 3312 ядер в системе.

MBC-100K — суперкомпьютер из 110 вычислительных модулей на базе процессоров Intel Xeon E5450, 8 ГБ оперативной памяти на модуль, пиковая производительность модуля — 96 GFLOPS, 880 ядер в системе.

На MBC-10П ОП среднее время расчета составило:

- раздел Haswell — 360 сек;
- раздел Broadwell — 376 сек;
- раздел Skylake — 417 сек.

Минимальное время запуска:

- раздел Haswell — 322 сек на 128 ядрах;
- раздел Broadwell — 361 сек на 208 ядрах;
- раздел Skylake — 371 сек на 128 ядрах.

Среднее время расчета на на MBC-10П МП2 KNL составило 1201 сек (почти в три раза больше, чем на любом из разделов MBC-10П ОП), минимальное время запуска — 1172 сек на 128 ядрах.

Среднее время расчета на МВС-10П Торнадо составило 263 сек (примерно на 25 % меньше, чем на любом из разделов МВС-10П ОП), минимальное время запуска — 235 сек на 160 ядрах.

Среднее время расчета на МВС-100К составило 570 сек (примерно на 50 % больше, чем на разделах МВС-10П ОП), минимальное время запуска — 480 сек на 128 ядрах.

На *рис. 1* показан сводный график зависимости времени работы программы Load от количества запрашиваемых процессорных ядер на основных системах МСЦ РАН. Минимальное время расчета показывает МВС-10П Торнадо. Для большинства суперкомпьютеров минимальное время счета достигается при использовании 128–208 ядер.

Рис. 1. Сводный график зависимости времени расчета от количества запрашиваемых процессорных ядер

Работа выполнена в МСЦ РАН в рамках государственного задания № 0580-2021-0016 и в рамках проекта РФФИ № 19-07-00861.

Расчеты проводились на высокопроизводительных вычислительных системах MBC-10П МП2 KNL, MBC-10П ОП, MBC 10П Торнадо, MBC-100К в Межведомственном суперкомпьютерном центре Российской академии наук.

Литература

1. World Health Organization Homepage <https://www.who.int/>, last accessed 2020/07/15
2. Калихман Р. С., Шебеко Ю. А. Моделирование роста перколяционных кластеров на компьютерах с сильно выраженной параллельной архитектурой // Сборник научных трудов РАН «Вычислительные технологии». Том 4. № 10. Сибирское отделение РАН. 1995 г.
3. Кондратьев М. А., Ивановский Р. И., Цыбалова Л. М. Применение агентного подхода к имитационному моделированию процесса распространения заболевания // Научно-технические ведомости СПбГУ/ Наука и образование. 2010. Т. 2. № 2(100). С. 189–195.
4. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. Учебное пособие. М.: УРСС, 2002. 64 с.
5. Утакаева И. Х. Имитационное моделирование распространения эпидемий на основе агентного подхода // Научный журнал КубГАУ. 2016. № 121(07) URL: <http://ej.kubagro.ru/2016/07/pdf/85.pdf> (дата обращения 09.10.2020).
6. S. Yu. Lapshina. High-Performance Computations in Multi-agent Simulation Problems of Percolation Cluster's Behavior // Lobachevskii Journal of mathematics. Volume 40, Issue 3 (2019), p. 341–348.
7. S. Yu. Lapshina. Parallel Cluster Multiple Labeling Technique // Lobachevskii Journal of Mathematics, Volume 40 Issue 5 (2019), p. 555–561.

References

1. World Health Organization Homepage <https://www.who.int/>, last accessed 2020/07/15
2. Kalihman R. S., Shebeko Yu A. Modelirovanie rosta perkolyacionnyh klasterov na kompyuterah s silno vyrazhennoj parallelnoj arhitekturoj // Sbornik nauchnyh trudov RAN Vychislitelnye tekhnologii. Tom 4. № 10. Sibirskoe otdelenie RAN. 1995 g.
3. Kondratev M. A., Ivanovskij R. I., Cybalova L. M. Primenenie agentnogo podhoda k imitacionnomu modelirovaniyu processa rasprostraneniya zabolevaniya // Nauchno-tekhnicheskie vedomosti. SPbGU. Nauka i obrazovanie. 2010. T 2. № 2(100). S 189–195.
4. Tarasevich Yu Yu. Perkolyaciya teoriya prilozheniya algoritmy // Uchebnoe posobie. M. URSS 2002. 64 s.
5. Utaakaeva I. H. Imitacionnoe modelirovanie rasprostraneniya ehpidemij na osnove agentnogo podhoda // Nauchnyj zhurnal KubGAU. 2016. 121(07) URL: <http://ej.kubagro.ru/2016/07/pdf/85.pdf> (data obrashcheniya 09.10.2020).

6. S. Yu. Lapshina. High-Performance Computations in Multi-agent Simulation Problems of Percolation Cluster's Behavior // Lobachevskii Journal of mathematics. Volume 40, Issue 3 (2019), p. 341–348
7. S. Yu. Lapshina. Parallel Cluster Multiple Labeling Technique // Lobachevskii Journal of Mathematics, Volume 40 Issue 5 (2019), p. 555–561