

УДК 519.876.5

А.Ф. Агеева

## КРУПНОМАСШТАБНЫЕ АГЕНТ-ОРИЕНТИРОВАННЫЕ МОДЕЛИ И ИХ ТЕХНИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРАХ

*Центральный экономико-математический институт РАН,  
Москва, Россия*

*В статье приведен обзор разработанных за рубежом в течение последнего десятилетия крупномасштабных агент-ориентированных моделей (мультиагентных систем). Рассмотрены основные аспекты, связанные с технической реализацией – процессом адаптации и запуска моделей на суперкомпьютерах (параллельных компьютерах): выбором методов распараллеливания моделей, оптимального специализированного программного обеспечения, программно-аппаратных средств для обеспечения высокой производительности параллельных вычислений. Показано многообразие научно-исследовательских задач, решаемых с помощью метода агент-ориентированного моделирования, являющегося современным инструментом анализа комплексных социальных, экономических, технологических и научных систем. Выявлены конструктивные особенности крупномасштабных моделей, реализация которых планируется их авторами с привлечением суперкомпьютерных технологий*

**Ключевые слова:** крупномасштабные агент-ориентированные модели, суперкомпьютерные технологии, параллельные вычисления, параллельные компьютеры

Роль имитационного компьютерного моделирования в различных областях науки, особенно в междисциплинарных направлениях, заметно возросла вследствие объективной сложности применения традиционных исследовательских методов анализа крупномасштабных, детализированных процессов. Виртуальная среда позволяет тестировать научные гипотезы и сценарии, обосновывая их, при этом метод агент-ориентированного моделирования является одним из наиболее распространенных и широко используемых инструментов анализа и получения прогнозных данных. Динамика глобальных и крупномасштабных процессов, устройство сложных комплексных систем – технологических, научных, социальных, в которых взаимодействуют миллионы индивидуумов или частей (частиц), воспроизводится в имитационной среде с учетом множества разнородных данных, поэтому, для получения более точных результатов в подобных исследованиях использование обычных компьютеров сегодня становится малоэффективным. В связи с чем, все более актуальной задачей запуска и технической реализации глобальных и крупномасштабных агент-ориентированных (мультиагентных) моделей становится использование возможностей суперкомпьютерных мощностей, позволяющих распределять вычисления по узлам – мультипроцессорам

суперкомпьютеров, значительно уменьшая время расчётов и увеличивая производительность агентных моделей. С архитектурой – технической структурой суперкомпьютеров, функционирующих в нашей стране, можно ознакомиться на официальных веб-сайтах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН ([jssc.ru](http://jssc.ru)), Центра коллективного пользования «Сибирский суперкомпьютерный центр» при Институте вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения РАН ([sscc.icmmg.nsc.ru](http://sscc.icmmg.nsc.ru)), Центра коллективного пользования научным оборудованием «Центр обработки и хранения научных данных Дальневосточного отделения РАН» ([lits.ccfbras.ru](http://lits.ccfbras.ru)).

В нашей предыдущей статье [1] дан краткий обзор актуальных глобальных проектов – крупномасштабных агент-ориентированных моделей (АОМ), реализуемых с использованием суперкомпьютерных технологий, среди которых самыми известными являются: FuturICT – беспрецедентный междисциплинарный проект по моделированию технологической, социальной и экономической систем мира, стартовавший в 2012 г. и вовлекший ученых практически из всех развитых стран; крупномасштабная АОМ европейской экономики – EURACE, работа над которой началась в 2006 г.; полномасштабная АОМ распространения эпидемий – US National Model, позволяющая оценивать последствия распространения заболеваний различного типа; АОМ для систем с эксафлопсной производительностью – комплексная адаптивная система рынка электроэнергии (Electricity Markets Complex Adaptive Systems – EMCAS) для оценки последствий дерегулирования рынка электроэнергии в штате Иллинойс (США) и т.д. В качестве примеров, осуществляемых в нашей стране проектов подобного масштаба, можно назвать АОМ, имитирующую социально-экономическое развитие России на ближайшие 50 лет, и демографические АОМ, созданные в Центральном экономико-математическом институте РАН; конструкция и принципы технической реализации последних при помощи специально разработанной технологии поддержки агент-ориентированного моделирования для суперкомпьютеров представлены в [2].

Процесс адаптации и запуска агент-ориентированных моделей (АОМ) и мультиагентных систем (МАС) на суперкомпьютерах является самостоятельной научной задачей, которая подразумевает решение ряда вопросов, связанных с конвертацией модели в версию для реализации на суперкомпьютере, выбора оптимального метода распараллеливания модели, специализированного программного обеспечения и программно-аппаратных средств, среди которых широко используемыми являются: - Repast for High Performance Computing (RepastHPC) – первое программное обеспечение (ПО), разработанное для проектирования АОМ с целью

последующего запуска на суперкомпьютерах; – высокопроизводительное ПО для построения крупномасштабных АОМ Pandora, предоставляющее полную поддержку геоинформационных систем (ГИС), что важно в тех случаях, когда для функционирования моделей необходима географическая привязка агентов; FLAME GPU – среда для крупномасштабного агент-ориентированного моделирования с обеспечением высокопроизводительных параллельных вычислений на графических процессорах GPU с возможностью визуализации полученных результатов.

Число программных продуктов для технической реализации АОМ и МАС на суперкомпьютерах постоянно увеличивается: они учитывают специфику агентных моделей, разрабатываемых для разнообразных целей и задач, особенности конструкции, логику поведения, языки программирования и т.д. Тем не менее, необходимость создания новых специализированных решений остается по-прежнему актуальной задачей, особенно в тех случаях, когда агентное моделирование используется как инструмент построения необычной и уникальной виртуальной среды. Например, Regelous S. разработал MASSIVE (Multiple Agent Simulation System in Virtual Environment) – программное средство для крупномасштабного агент-ориентированного моделирования групповых сцен и связанных с ними визуальных эффектов, используемых в компьютерной анимации, кино- и телеиндустрии [3]. Впервые MASSIVE использовалось для создания сцен масштабных сражений в художественном фильме «Властелин Колеца», вышедшем на экраны в 2001 г.; с помощью ПО были созданы около 100 000 агентов, наделенные: различными индивидуальными параметрами (физическими, эмоциональными и т.д.), 8000 поведенческих алгоритмов, 350 алгоритмами взаимодействия и передвижения, т.о. было достигнуто многообразие персонажей и визуальных эффектов для правдоподобности батальных сцен, созданных с привлечением суперкомпьютерных технологий.

Анализ АОМ и МАС, реализованных с помощью суперкомпьютерных ресурсов, показывает, что запуск агентных моделей все чаще осуществляется с использованием графических процессоров GPU (Graphics Processing Unit), которые, в отличие от центральных процессоров CPU (Central Processing Unit), поддерживают исполнение многопоточных параллельных вычислений, обеспечивая увеличение производительности агентных моделей во много раз. Tamrakar S. [4] сравнивает выходные данные АОМ иммунной системы, разработанной Folcik et al. [5] и реализованной ими при помощи RepastHPC, с результатами своей работы по технической реализации данной модели на суперкомпьютере при помощи FLAME GPU, прогоняя сценарий ответной реакции на вирусную

инфекцию. Автор видоизменил метод хаотичного движения агентов АОМ, но при этом проверял статистическую погрешность расчётов, чтобы убедиться в сохранности логики поведения модели. Результаты демонстрируют увеличение производительности модели в 13 раз.

Для облегчения расчетно-вычислительных процессов на GPU, широко используется программно-аппаратная архитектура CUDA (Compute Unified Device Architecture) компании NVIDIA, позволяющая эффективно управлять памятью графического ускорителя. Tang W. и Bennett D.A. [6] создали АОМ динамики землепользования сельскохозяйственных земель на западе штата Монтана с ускорением вычислений на графических мультипроцессорах GPU с использованием CUDA. Агентами модели являются владельцы земельных участков, которые представлены пространственными ячейками. В АОМ имитировали процесс влияния социального взаимодействия на динамику землепользования (агенты обмениваются мнениями для выбора наиболее рационального решения о стратегии устойчивого развития территорий – процесс отражается через переменные параметры). Авторы модели разработали алгоритм параллельных вычислений, который преобразовывает данные, разбивая их на группы, каждая из которых обрабатывается отдельными потоками на GPU-процессорах суперкомпьютера.

В [7, 8] представлена конструкция для агент-ориентированного моделирования на GPU масштабных интерактивных эвакуационных планов с возможностью быстрого внесения коррективов в реальном режиме времени. АОМ обрабатывается внутри FLAME GPU через движок шаблонов, который преобразовывает файл модели в коды CUDA. Агенты-пешеходы передвигаются по ячейкам зоны эвакуации к цели (выход-дверь и т.п.) с помощью навигационных векторов, учитывающих скорость агентов, их положение в ячейках и расстояния между ними и препятствиями, а также область обзора и предупреждение столкновения. Агенты наделяются матрицами индивидуального пространства и в потоках параллельных вычислений вершинный шейдер (программа создания теней в вершинах, аппроксимирующая поверхность многоугольников) визуализирует положение каждого агента в индивидуальном пространстве ячейки с помощью метода опорных кадров. Сравнительные прогоны модели были выполнены с шагами ячеек 64, 128, 256, 512 и количеством пешеходов, начиная от 1024 до 262144, а за образец зоны эвакуации был принят один из районов Лондона.

Zia K. et al. [9] создали АОМ городской эвакуации, в которой привязанная к GIS-координатам растровая карта г. Линц представлена ячейками, объединенными в сектора, в которых перемещаются агенты-пешеходы. Они наделяются параметрами информированности о

характеристиках пространства, а скорость их передвижения зависит от «загруженности» (плотности) ячеек. Реализация модели осуществлялась при помощи RepastHPC. Вначале модель разгонялась на микроуровне, в одном секторе города (100x100 ячеек с 12500 агентами на компьютере с одноядерным процессором CPU), затем – на макроуровне (200 секторов, каждый состоит из 500 ячеек; потоки вычислений по каждому сектору обрабатывались на отдельных узлах – графических процессорах GPU суперкомпьютера).

Наиболее распространённым методом распараллеливания крупномасштабных АОМ и МАС является пространственно-распределенный, подразумевающий разделение имитационной среды модели на множество ячеек (сегментов) с агентами, располагающимися в пределах их границ по принципу территориального соседства, для того чтобы распределить вычислительную нагрузку равномерно по узлам (процессорам) суперкомпьютера; параллельные вычисления осуществляются с обеспечением условия синхронизации их потоков, при этом, как правило, выделяется один узел, выдающий задания и собирающий результаты расчетов со всех других узлов.

В АОМ [10,11,12,13] популяции агентов – индивидуумов или представителей различных биологических видов, наделенные алгоритмами индивидуального и группового поведения (посредством акторов), взаимодействуют друг с другом или с окружающей средой – имитационным пространством, воспроизводящим ареалы их обитания с присущими им природно-климатическими характеристиками; для обеспечения параллельных вычислений пространство разделялось на множество равных сегментов (ячеек), например в [10] их количество достигло  $3.2 \times 10^5$ , а в [13] – более 7 млн., поэтому в [13] параллельные вычисления выполнялись с помощью CUDA на GPU по объединенным в блоки ячейкам ( $256 \times 256$ ), т.е по 65536 потокам имитационного процесса. В АОМ имитировали: [10] – глобальную ретроспективную пространственно-временную динамику расселения неандертальцев с целью исследования влияния изменяющихся условий среды на популяционные процессы, связанные с воспроизводством, распространением, выживанием и исчезновением вида древних людей (вычисления проводились на суперкомпьютере Cray XE6 Monte Rosa в Швейцарском национальном суперкомпьютерном центре); [11] – жизненный цикл популяций дафнии *Daphnia* и микижи *Oncorhynchus mykiss* и их взаимодействия по типу «хищник-добыча»; в [12] – жизненный цикл и распространение тли вида *Rhopalosiphum padi* в сельских районах Великобритании с целью прогнозирования воздействия на сельскохозяйственные культуры и выбора эффективных режимов пестицидов (параллельные вычисления

выполнялись с помощью RepastHPC на кластере Beowulf в университете Лидс); [13] – жизненный цикл и распространение (нашествие) мухи *Chrysomya bezziana* в Австралии с целью прогнозирования негативного влияния на животноводческую отрасль.

Для оптимизации параллельных вычислений в [11] Nichols J. A. объединил последовательную и параллельную базы исходных кодов модели, а также разработал алгоритм перебалансировки, распределяющий количество потоков по узлам (CPU процессорам) параллельного компьютера. Автор принял за имитационную единицу расчеты, связанные с одной возрастной группой агентов в течение одного шага, заложив этот принцип в модуль агентов; модуль популяций использует модули возрастных групп агентов итеративным способом. Нагрузочные испытания модели имитировали 729 экотипов со всеми возрастными группами популяций с 58320 параметрами характеристик агентов, которые в ходе прогонов модели возросли до 300 тысяч.

Стоит отметить, что параллельные методы вычислений, применяемые в процессе технической реализации MAC и AOM на суперкомпьютерах, позволяют значительно увеличивать производительность моделей, а в отсутствии доступа к суперкомпьютерным ресурсам, могут использоваться для получения адекватных результатов имитирования в AOM с высоким уровнем детализации, при условии определения оптимального соотношения между количеством агентов (интенсивности их взаимодействия) и нагрузки на процессор компьютера. Perez-Rodriguez et al. [14], прогоняя трехмерную AOM биомолекулярной каталитической активности клетки и увеличивая количество агентов модели, сравнивали результаты применения однопоточного последовательного и параллельных методов вычислений, продемонстрировав эффективность последних. Целью своей работы авторы ставили создание модели-шаблона и выбор оптимального вычислительного метода, позволяющего имитировать реальные биохимические и биофизические процессы в клетке с учетом технических возможностей компьютеров, широко используемых в научно-исследовательских лабораториях.

Одна из актуальных задач в биомедицине связана с поиском методов исследований, объединяющих детализированные клеточные и молекулярные механизмы. Высокопроизводительные AOM [15,16,17], имитирующие строение тканей и частей органов человека на клеточно-молекулярном уровне, разработаны для детального изучения течения различных заболеваний с целью создания эффективных лекарств и протоколов лечения: воспалительных процессов в тканях кишечника [15], ранней стадии развития ВИЧ в организме человека [16], воспаления голосовых связок вследствие механического повреждения их тканей [17].

Агенты – элементы клеточно-молекулярной структуры (тромбоциты, нейтрофилы, макрофаги, фибробласты и т.д., а также в [16] вирусные частицы – вирионы) взаимодействуют в пространстве клеток, которые представлены: в [15] – двумерными ячейками, которые воспроизводят поверхность тканей и образуют трехмерную гистологию; [16] – двумерными матрицами размером  $10^{-8}$  м<sup>3</sup>, которые воспроизводят лимфатические узлы и образуют лимфатическую систему; [17] – двумерными ячейками размером 15 мкм, образующими ткани голосовых связок.

АОМ [15], разработанная в C++, является конструкцией общего строения тканей кишки (части кишечника); в пользовательской версии модели предусматривается контроль расчетно-вычислительных взаимодействий процессоров суперкомпьютера, а также возможность уменьшения дополнительных расчётов, которые имеются в составе общего пакета АОМ. Реализация модели осуществлялась на суперкомпьютерах Beagle и Midway в Чикагском университете. Авторы модели подсчитали, что для усовершенствования имитационных моделей, воспроизводящих целые органы человека и процессы, протекающие в их тканях, при условии использования имеющихся суперкомпьютерных мощностей, имитирование тканей толстого и тонкого кишечника в течение одного имитационного года потребует задействовать 2,4 млн. ядер процессоров и 40 ч вычислений (для примера, имитирование процесса метаплазии в данной модели задействовано 12672 ядра), а если к этой задаче добавить имитирование воспалительного заболевания кишечника, то вычисления растянутся на несколько дней. Сердце человека состоит из более 10 млрд. клеток, печень – 200 млрд., мозг – 400 млрд., пищеварительный тракт – 500 млрд. Т.о. в будущем, развитие суперкомпьютерных технологий позволит имитировать строение тканей органов человека на молекулярно-клеточном уровне и течение сложных заболеваний, длящихся годами.

Метод агентного моделирования используется также для программирования комбинированных схем передвижения населения городов с целью оценки загруженности дорожно-транспортных сетей и магистралей, построения систем поддержки, мониторинга и управления дорожно-транспортной ситуацией в городах и мегаполисах, а также выбора стратегий устойчивого развития их территорий с учетом контроля объемов выбросов. Крупномасштабные транспортные МАС и АОМ, как правило, разрабатываются с помощью использования специализированных инструментов, таких как, например, MATSim (Multi-Agent Transport Simulation Toolkit) – ПО для агентного моделирования транспортных систем, в основе которого лежит концепция использования индивидуальных модулей (алгоритмов) перемещения агентов.

Агентами крупномасштабных транспортных АОМ [18, 19, 20, 21], в которых имитируются внутридневные транспортные потоки, являются жители городов, пользующиеся общественным или личным автотранспортом, или же транспортные средства (ТС) – частные легковые автомобили, коммерческие, грузовые. Агенты передвигаются по автодорогам (привязанным к GIS-координатам), в соответствии с индивидуальным планом-маршрутом из набора цепочек перемещений («дом-работа-дом», «предприятие-пункт назначения-предприятие», т.п.). Для создания индивидуальных алгоритмов агентов авторы пользовались результатами статистических данных, социологических опросов, данных GPS-навигаторов. Каждый участок дороги в имитационной среде АОМ принадлежит своей пространственной зоне – ячейке, а каждая пространственная область модели представляет собой уникальную комбинацию «ячейка-время»: т.о. воспроизводятся маршруты движения агентов в течение различных временных суточных интервалов.

В АОМ [19] автор взял за основу концепцию постоянных (связанных с работой, учебой и т.п.) и гибких, непредвиденных или случайных передвижений агентов-индивидуумов и разработал алгоритм, который воспроизводит персонализированные графики передвижений агентов – 1% жителей г. Сингапура в границах определенных временных интервалов. Алгоритм использует ментальную карту, состоящую из последовательности разных типов передвижений агентов и набора посещаемых агентами точек-мест. Параллельные вычисления по сценариям внутридневного транспортного потока прогонялись с количеством агентов: в АОМ [18] – 10% индивидуальных легковых ТС Амстердама; [20] – 5% ТС в Гуантанге (ЮАР); [21] – 100% ТС Швейцарии, т.е. 7,2 млн. ТС и 25 млн. поездок (имитационное пространство модели состояло из 3066 ячеек, 28622 звеньев и 10572 узловых точек дорожно-транспортной сети страны). Последняя АОМ реализована на параллельном компьютерном кластере Beowulf. Планируемое авторами усовершенствование транспортных АОМ [18, 19, 20] в части сценариев полномасштабной транспортной загруженности дорожной сети, в т.ч. тестирования крупномасштабных сценариев чрезвычайных ситуаций, таких как аварийное отключение электроэнергии в городе, моделирование выбросов и теплового купола над городом как результат транспортных пробок, потребует использования суперкомпьютерных технологий, и соответственно, выбора эффективного метода распараллеливания моделей.

Примером исследований, посвященных решению данной задачи, можно назвать созданную Ma Z. и Fukuda M. с помощью языков программирования Java и C++ библиотеку MASS – Multi-Agent Spatial Simulation [22], предназначенную для распараллеливания



крупномасштабных транспортных АОМ, созданных при помощи MATSim. Принцип распараллеливания АОМ с помощью библиотеки MASS заключается в использовании матриц пространственных элементов (ПЭ): расчеты по ПЭ, в которых расположены агенты модели, автоматически распределяются по узлам суперкомпьютера. Агенты могут мигрировать по ПЭ или взаимодействовать др. с др., но при этом сохраняют индексы своих матриц. MASS делит ПЭ на меньшие сегменты, которые вычисляются затем на отдельных потоках. Агенты группируются и группы размещаются на отдельных процессах, которые далее обрабатываются множеством потоков; т.о. достигается высокая производительность крупномасштабных транспортных АОМ.

К настоящему времени создано большое количество крупномасштабных АОМ эпидемиологического контроля и регулирования, а также специализированных инструментов для высокопроизводительного моделирования динамики контагиозных заболеваний, таких как например, FRED (Framework for Reconstructing Epidemic Dynamics), DISimS (Distributed Interactive Simulation System), EpiSimS (The Epidemic Simulation System) и др. Zhang M. в [23] представил новую конструкцию для изучения динамики эпидемий с целью эпидемиологического мониторинга и регулирования, приняв часть концептуальных основ разработанных ранее АОМ. В модели воспроизводится взаимосвязь основных компонентов: агентов-индивидуумов; пространственных объектов, соотносящихся с конкретными GIS-координатами; эпидемиологически-регулятивных мер; функциональных объектов, влияющих на характеристики предыдущих компонентов модели (например, болезнь изменяет статус здоровья агентов, а ливень – температуру пространственных объектов); социальных контактов. Агенты выполняют ежедневную (еженедельную) программу из набора видов деятельности или активности (всего 20 типов ежедневных расписаний агентов для каждого вида социального статуса) и могут принимать (отклонять) «приглашения» от друзей или организаций присоединиться к др. активности на основе анализа условий для его реализации (оценивают дистанцию и необходимое время, сравнивая данные со своим графиком, осуществляя в итоге социальные контакты). Особенностью АОМ является внедрение специального алгоритма для управления пространственными элементами (ПЭ), который оптимизирует хранение и извлечение объектов в системе (ПЭ), повышая скорость вычислений, кроме того, ПЭ в модели наделены функцией определения дистанции до ближайшего заданного объекта или внутри определенного радиуса на основе GIS-данных при помощи алгоритма вычисления кратчайших расстояний, которым пользуются агенты в процессе внутрисуточных перемещений. Для верификации модель прогонялась на

суперкомпьютере по сценарию распространения вируса  $N_1H_1$  в Пекине с 19,6 млн. агентов – жителей города, 8 млн. пространственных объектов, 200 млн. процессов по видам социальной активности и деятельности агентов.

С помощью агентного моделирования исследуются различные аспекты социального взаимодействия, с учётом индивидуальных и групповых поведенческих особенностей. С появлением, быстрым и повсеместным распространением интернет-технологий, возникла необходимость изучения поведения людей в интернет-пространстве. Ariyaratne A. [1] и Gatti M. et al. [6] разработали крупномасштабные АОМ, в которых имитируются действия пользователей социальной сети Твиттер (Twitter).

АОМ [24] создавалась с целью разработать систему, которая может конвертировать собранные данные о реальных пользователях сети Интернет для прогнозирования коллективного поведения. Конструкция модели состоит из: базы данных, препроцессора, генератора поведенческих алгоритмов, агент-ориентированного модуля и постпроцессора, который интерпретирует и визуализирует результаты вычислений. Агенты наделены индивидуальным набором поведенческих алгоритмов и сгруппированы как акторы; агенты имеют встроенные автоматы (которые считывают процесс получения сообщений) и списки друзей. Модуль-анализатор читает Java Script Object Notation файлы и конвертирует данные, встраивая их во внутреннюю структуру агентов в процессе их инициализации. АОМ создана с помощью нескольких языков программирования, в т.ч. с помощью языка кодирования Erlang; комплектование системы выполнено с помощью Python и R-скриптов, а также Pandas.

Авторы АОМ [25] изучали влияние социального взаимодействия на поведение агентов в соцсетях, анализируя страницу (контакты, посты, комментарии) Б.Обамы (B.Obama) в Twitter во время президентской предвыборной гонки 2012 г. Агенты модели – пользователи соцсети, наделенные набором образцов поведения и классификатором эмоционального реагирования на опубликованные посты (позитивная или негативная реакция). Авторы сравнивали выходные данные модели по количеству постов, опубликованных агентами, с количеством постов реальных пользователей соцсети. Модель прогоняли на Red Hat x86\_64 Linux, 256 GB, 16 CPU по сценариям с неравномерными внутрисуточными периодами для изучения динамики социальных контактов 24526 агентов. Планируется усложнение АОМ и имитирование крупномасштабных сценариев на суперкомпьютере.

Анализ разработанных крупномасштабных АОМ и МАС позволяет сделать вывод, что агент-ориентированное моделирование является современным инструментом анализа комплексных социальных, технологических и научных систем: с помощью агентного моделирования можно исследовать структуру и динамику сложных процессов и явлений одновременно «сверху-вниз» и «снизу-вверх», т.е. на детализированном и глобальном уровнях с выявлением логики и основных принципов взаимовлияющего характера. На основе выходных данных крупномасштабных АОМ и МАС строятся прогнозы и решаются разнообразные прикладные научно-исследовательские задачи.

Дальнейшее усовершенствование современных методов научного анализа и прогнозирования, в т.ч. агентного моделирования, напрямую связано с развитием суперкомпьютерных технологий, позволяющих воспроизводить динамику и структуру комплексных систем и связанных с ними процессов и явлений, в реальном (или максимально приближенном к реальному) масштабе. Усилия, направленные на многократное увеличение производительности имитационных моделей – создание специализированного программного обеспечения и программно-аппаратных средств – приведут к тому, что имитационное моделирование, в т.ч. интерактивное и с возможностью визуализации, соотносящееся с реальными масштабами воспроизводимых систем, получит широкое распространение во многих отраслях науки в ближайшем будущем.

*Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант №14-18-01968).*

## ЛИТЕРАТУРА

1. Макаров В.Л., Бахтизин А.Р., Сушко Е.Д., Васенин В.А., Борисов В.А., Роганов В.А. Агент-ориентированные модели: мировой опыт и технические возможности реализации на суперкомпьютерах // Вестник Российской Академии Наук - 2016. т. 86, №3, с. 252-262.
2. Макаров В.Л., Бахтизин А.Р., Сушко Е.Д., Васенин В.А., Борисов В.А., Роганов В.А. Суперкомпьютерные технологии в общественных науках: агент-ориентированные демографические модели // Вестник Российской Академии Наук – 2016. т.86, №5. с. 412-421.
3. Davis G., Far B.H. Massive – Multiple agent simulation system in a virtual environment // Working Paper. University of Calgary. 02/01/03.
4. Tamrakar S. Performance optimization and statistical analysis of basic immune simulator (BIS) using the FLAME GPU environment // Theses and Dissertations. Paper 963. 2015.

5. Folcik V. A., An G. C., Orosz C. G. The basic immune simulator: an agent-based model to study the interactions between innate and adaptive immunity // *Theoretical biology and medical modelling*, vol. 4, p. 39, 2007.
6. Tang W., Bennett D.A. Parallel agent-based modelling of land-use opinion dynamics using graphics processing units / Conference paper. Proceedings of the 10th International Conference on GeoComputation. 2009.
7. Karmakharm T., Richmond P., Romano D.M. Agent-based large scale simulation of pedestrians with adaptive realistic navigation vector fields // *Proceedings of Theory and Practice of Computer Graphics*, Sheffield, 2010.
8. Richmond P., Romano D.M. A High performance framework for agent-based pedestrian dynamics on GPU hardware // *Proceedings of EUROSIS ESM 20 (European Simulation and Modelling)*, Oct. 27-29, 2008.
9. Zia K., Farrahi K., Riener A., Ferscha A. An agent-based parallel geo-simulation of urban mobility during city-scale evacuation // *Simulation – 2013*. Doi: 10.1177/0037549713485468
10. Callegari S., Weismann J.D., Tkachenko N., Zollikofer C.P. An agent-based model of human dispersals at a global scale // *Advances in Complex Systems* 16(4-5), 2013. Doi: 10.1142/S021952913500239
11. Nichols J. A. Parallel simulation of individual-based, physiologically-structured population and predator-prey ecology models. PhD thesis. University of Tennessee. 2008.
12. Parry H. R. Effects of land management upon species population dynamics: a spatially explicit, individual-based model / PhD thesis. University of Leeds. 2006.
13. Welch M., Kwan P., Sajeev A.S.M. A high performance, agent-based simulation of old world screwworm fly lifecycle and dispersal using a graphics processing unit (GPU) platform // *Proceedings of 20th International Congress on Modelling and Simulation*. Australia, 2013. pp. 782-788.
14. Perez-Rodriguez G., Perez-Perez M., Fdez-Riverola F., Lourenco A. High performance computing for three-dimensional agent-based molecular models // *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 68 (2016). pp. 68-77.
15. Cockrell R.C., Christley S., Chang E., An G. (2015) Towards anatomic scale agent-based modeling with a massively parallel spatially explicit general-purpose model of enteric tissue (SEGMENT\_HPC). *Plos One* 10(3): e0122192. doi:10.1371/journal.pone.0122192
16. Perrin D., Ruskin H.J., Crane M. Model refinement through high-performance computing: an agent-based HIV example // *Immunome Research*. 2010; 6. Doi: 10.1186/1745-7580-6-S1-S3
17. Seekhao N., Shung C., JaJa J., Mongeau L., Li-Jessen N.Y.K. Real-time agent-based modeling simulation with in-situ visualization of complex biological systems – a case study on vocal fold inflammation and healing //

- IEEE International Workshop on High Performance Computational Biology, 2016. pp. 463-472.
18. Joubert J.W., Fourie P.J., Axhausen K.W. Large-scale agent-based combined traffic simulation of private cars and commercial vehicles. *Transportation Research Record* – 2010. 2168:24-32
  19. Medina S. A. O. Personalized multi-activity scheduling of flexible activities / Future Cities Laboratory. Working paper. Jul., 2015.
  20. Melnikov V.R., Krzhizhanovskaya V.V., Lees M.H., Boukhanovsky A.V. Data-driven travel demand modeling and agent-based traffic simulation in Amsterdam urban area // *Procedia Computer Science* – 2016. v. 80, pp. 2030-2041.
  21. Raney B., Voellmy A., Cetin N., Nagel K. Large scale multi-agent transportation simulations / *Conference Papers, 42nd Congress of the European Regional Science Association*. Aug., 2002, Dortmund, Germany
  22. Ma Z., Fukuda M. A multi-agent spatial simulation library for parallelizing transport simulations // *Proceedings of the 2015 Winter Simulation Conference*, pp. 115-126.
  23. Zhang M. Large-scale agent-based social simulation - a study on epidemic prediction and control / *Thesis. National University of Defense Technology, China*. 2016. SIKS № 2016-28.
  24. Ariyarante A. Large-scale agent-based modeling: simulating Twitter users. *Master of Science Thesis* – 56 p. University of Maryland. 2016.
  25. Gatti M., Cavalin P., Neto S.B., Pinhanez C., Santos C., Gribel D., Appel A.P. Large-scale multi-agent-based modeling and simulation of microblogging-based online social network // *MABS 2013, LNAI 8235*, pp. 17-33, 2014. Doi: 10.1007/978-3-642-54783-6\_2

A.F.Ageeva

## **LARGE-SCALE AGENT-BASED MODELS AND THEIR TECHNICAL IMPLEMENTATION ON SUPERCOMPUTERS**

*Central Economics and Mathematics Institute of RAS,*

*The article provides an overview of large-scale agent-based models (multi-agent systems) developed over the last decade, analyzing the main aspects, related to the technical implementation - the process of adaptation and running models on supercomputers (or parallel clusters). The variety of scientific-research tasks solved with the help of agent simulation is shown, as well as the design features of large-scale models are listed, and their realization is planned by their authors with the use of supercomputer technologies.*

*The article has been prepared with the support of the Russian Science Foundation (Grant №14-18-01968).*

**Keywords:** large-scale agent-based models, supercomputers, parallel computing, parallel computers, parallel clusters

## REFERENCES

1. Makarov V.L., Bakhtizin A.R., Sushko E.D., Vasenin V.A., Borisov V.A., Roganov V.A. Agent-orientirovannyye modeli: mirovoy opyt i tekhnicheskie vozmozhnosti realizatsii na superkomp'yuterakh // Vestnik Rossiyskoy Akademii Nauk - 2016. t. 86, No.3, pp. 252-262.
2. Makarov V.L., Bakhtizin A.R., Sushko E.D., Vasenin E.A., Borisov V.A., Roganov V.A. Superkomp'yuternyye tekhnologii v obshchestvennykh naukakh: agent-orientirovannyye demograficheskie modeli // Vestnik Rossiyskoy Akademii Nauk – 2016. t.86, No.5. pp. 412-421.
3. Davis G., Far B.H. Massive – Multiple agent simulation system in a virtual environment // Working Paper. University of Calgary. 02/01/03.
4. Tamrakar S. Performance optimization and statistical analysis of basic immune simulator (BIS) using the FLAME GPU environment // Theses and Dissertations. Paper 963. 2015.
5. Folcik V. A., An G. C., Orosz C. G. The basic immune simulator: an agent-based model to study the interactions between innate and adaptive immunity // Theoretical biology and medical modelling, vol. 4, p. 39, 2007.
6. Tang W., Bennett D.A. Parallel agent-based modelling of land-use opinion dynamics using graphics processing units / Conference paper. Proceedings of the 10th International Conference on GeoComputation. 2009.
7. Karmakharm T., Richmond P., Romano D.M. Agent-based large scale simulation of pedestrians with adaptive realistic navigation vector fields // Proceedings of Theory and Practice of Computer Graphics, Sheffield, 2010.
8. Richmond P., Romano D.M. A High performance framework for agent-based pedestrian dynamics on GPU hardware // Proceedings of EUROSIS ESM 20 (European Simulation and Modelling), Oct. 27-29, 2008.
9. Zia K., Farrahi K., Riener A., Ferscha A. An agent-based parallel geo-simulation of urban mobility during city-scale evacuation // Simulation – 2013. Doi: 10.1177/0037549713485468
10. Callegari S., Weismann J.D., Tkachenko N., Zollikofer C.P. An agent-based model of human dispersals at a global scale // Advances in Complex Systems 16(4-5), 2013. Doi: 10.1142/S021952913500239
11. Nichols J. A. Parallel simulation of individual-based, physiologically-structured population and predator-prey ecology models. PhD thesis. University of Tennessee. 2008.
12. Parry H. R. Effects of land management upon species population dynamics: a spatially explicit, individual-based model / PhD thesis. University of Leeds. 2006.
13. Welch M., Kwan P., Sajeev A.S.M. A high performance, agent-based simulation of old world screwworm fly lifecycle and dispersal using a

- graphics processing unit (GPU) platform // Proceedings of 20th International Congress on Modelling and Simulation. Australia, 2013. pp. 782-788.
14. Perez-Rodriguez G., Perez-Perez M., Fdez-Riverola F., Lourenco A. High performance computing for three-dimensional agent-based molecular models // *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 68 (2016). pp. 68-77.
  15. Cockrell R.C., Christley S., Chang E., An G. (2015) Towards anatomic scale agent-based modeling with a massively parallel spatially explicit general-purpose model of enteric tissue (SEGMEnt\_HPC). *Plos One* 10(3): e0122192. doi:10.1371/journal.pone.0122192
  16. Perrin D., Ruskin H.J., Crane M. Model refinement through high-performance computing: an agent-based HIV example // *Immunome Research*. 2010; 6. Doi: 10.1186/1745-7580-6-S1-S3
  17. Seekhao N., Shung C., JaJa J., Mongeau L., Li-Jessen N.Y.K. Real-time agent-based modeling simulation with in-situ visualization of complex biological systems – a case study on vocal fold inflammation and healing // *IEEE International Workshop on High Performance Computational Biology*, 2016. pp. 463-472.
  18. Joubert J.W., Fourie P.J., Axhausen K.W. Large-scale agent-based combined traffic simulation of private cars and commercial vehicles. *Transportation Research Record – 2010*. 2168:24-32
  19. Medina S. A. O. Personalized multi-activity scheduling of flexible activities / *Future Cities Laboratory*. Working paper. Jul., 2015.
  20. Melnikov V.R., Krzhizhanovskaya V.V., Lees M.H., Boukhanovsky A.V. Data-driven travel demand modeling and agent-based traffic simulation in Amsterdam urban area // *Procedia Computer Science – 2016*. v. 80, pp. 2030-2041.
  21. Raney B., Voellmy A., Cetin N., Nagel K. Large scale multi-agent transportation simulations / *Conference Papers, 42nd Congress of the European Regional Science Association*. Aug., 2002, Dortmund, Germany
  22. Ma Z., Fukuda M. A multi-agent spatial simulation library for parallelizing transport simulations // *Proceedings of the 2015 Winter Simulation Conference*, pp. 115-126.
  23. Zhang M. Large-scale agent-based social simulation - a study on epidemic prediction and control / *Thesis*. National University of Defense Technology, China. 2016. SIKS No. 2016-28.
  24. Ariyarante A. Large-scale agent-based modeling: simulating Twitter users. *Master of Science Thesis – 56 p*. University of Maryland. 2016.
  25. Gatti M., Cavalin P., Neto S.B., Pinhanez C., Santos C., Gribel D., Appel A.P. Large-scale multi-agent-based modeling and simulation of microblogging-based online social network // *MABS 2013, LNAI 8235*, pp. 17-33, 2014. Doi: 10.1007/978-3-642-54783-6\_2