

Институт вычислительного моделирования СО РАН
Сибирский федеральный университет
Институт вычислительных технологий СО РАН
Институт динамики систем и теории управления СО РАН
Новосибирский государственный университет
Сибирский государственный аэрокосмический университет
имени академика М.Ф. Решетнева

Седьмая межрегиональная школа-семинар

**РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ
И КЛАСТЕРНЫЕ
ВЫЧИСЛЕНИЯ**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Красноярск – 2010

УДК 518.65
Р 24

Распределенные и кластерные вычисления: Тезисы докладов Седьмой межрегиональной школы-семинара / Красноярск: Учреждение Российской академии наук Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения РАН. Красноярск, 2010.

Школа-семинар «Распределенные и кластерные вычисления» проводилась 12 – 14 октября 2010 года в ИВМ СО РАН (г. Красноярск) при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 10-01-06826-моб_г).

Основные направления Школы-семинара:

- проблемы математического моделирования на базе многопроцессорных вычислительных систем;
- параллельные вычисления при моделировании динамики сложных дискретных систем;
- параллельное программирование в мультимедийных системах, обработке сигналов и изображений;
- управление параллельными вычислениями;
- инструменты для создания и использования параллельных программ;
- проблемы удаленного доступа к вычислительным ресурсам.

Состав оргкомитета:

Шайдуров В.В. (председатель), чл.-корр. РАН, директор ИВМ СО РАН

Садовский В.М. (заместитель председателя), профессор, зам. директора ИВМ СО РАН

Варыгина М.П. (секретарь Оргкомитета), научный сотрудник ИВМ СО РАН

Бычков И.В., чл.-корр. РАН, директор ИДСТУ СО РАН

Вейсов Е.А., профессор, проректор СибГАУ

Доррер Г.А., профессор, зав. кафедрой СибГТУ

Кытманов А.М., профессор, директор Института математики, СФУ

Легалов А.И., профессор, СФУ

Москвичев В.В., профессор, директор СКТБ «Наука» КНЦ СО РАН, зам. председателя Президиума КНЦ СО РАН

Смагин С.И., чл.-корр. РАН, директор ВЦ ДВО РАН

Старченко А.В., профессор, зав. кафедрой Томского государственного университета

Турчановский И.Ю., зам. директора по научной работе ИСЭ СО РАН

Федорук М.П., профессор, зам. директора ИВТ СО РАН

Федотов А.М., чл.-корр. РАН, проректор Новосибирского государственного университета

Хихич В.К., профессор, директор Центра информационных технологий, СибГАУ

Шокин Ю.И., академик РАН, директор ИВТ СО РАН

Эпов М.И., академик РАН, директор ИНГТ СО РАН

СИСТЕМА КРАТКОСРОЧНОГО ПРОГНОЗА КАЧЕСТВА ВОЗДУХА НАД УРБАНИЗИРОВАННОЙ ТЕРРИТОРИЕЙ

Барт А.А., Старченко А.В.

Томский государственный университет

Окружающая Землю атмосфера представляет собой сложную природную систему, в которой протекают тесно взаимосвязанные процессы различной природы: динамические, химические, физические. Проводимые измерения дают лишь “снимок” состояния атмосферы для конкретного момента времени и конкретной местности. Кроме того, понимание отдельных, протекающих в атмосфере процессов не дает полного представления о системе в целом. Математические модели, с другой стороны, дают возможность исследования состояния и поведения атмосферы с учетом процессов, происходящих в атмосфере, и их взаимодействия между собой. Также отметим, что математические модели дают возможность предсказания метеорологических параметров и значений концентраций примеси [1].

В работе описывается программный комплекс, основная задача которого ежедневно предоставлять пользователям результаты краткосрочного прогноза концентрации компонентов примеси в воздухе над городом Томском.

Работа комплекса состоит из двух последовательных этапов. На первом этапе происходит получение результатов метеорологического прогноза по глобальной модели ПЛАВ [2], обработка и представление результатов на сайте. На втором этапе для расчета концентрации компонентов примеси применяется эйлерова модель турбулентной диффузии, включающая транспортные уравнения с описанием адвекции, турбу-

лентной диффузии и химических реакций [3]. Используется механизм химических реакций из [4]. Расчет концентраций производится на кластере ТГУ СКИФ Cyberia [5].

Литература

- [1] Seinfeld J.H., Pandis S.N. Atmospheric chemistry and physics. From air pollution to climate change. John Wiley, Sons, Inc., New York, 1998. 1326 p.
- [2] Толстых М.А. Полулагранжева модель атмосферы с высоким разрешением для численного прогноза погоды // Метеорология и гидрология, 2001. № 4. С. 5–16.
- [3] Старченко А.В., Беликов Д.А. Численная модель для оперативного контроля уровня загрязнения городского воздуха // Оптика атмосферы и океана, 2003. Т. 16, № 7. С. 657–665.
- [4] Gross A., Stockwell W.R., Sorensen J.H. A Comparative Study of Two Photo-Oxidant Dispersion Models and Their Applicability for Regional Air Quality Forecasting // Air Pollution Modeling and Its Application XIV, Plenum Publisher, New York, 2001. P. 317–326.
- [5] <http://skif.tsu.ru>

АЛГОРИТМЫ С РАСЩЕПЛЕНИЕМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СЖАТИЯ СПЛАЙН-КРИВЫХ ¹

Бекмуратов А.Т., Шумилов Б.М., Матанов Ш.М., Эшаров Э.А.
Ошский государственный университет

Базис в линейном пространстве эрмитовых кубических сплайнов составляет множество сжатий и сдвигов функций:

$$\varphi_0(t) = \begin{cases} t^2(3-2t), & 0 \leq t \leq 1, \\ (2-t)^2(2t-1), & 1 \leq t \leq 2, \\ 0, & t \notin [0, 2]; \end{cases}$$

$$\varphi_1(t) = \begin{cases} -t^2(1-t), & 0 \leq t \leq 1, \\ (2-t)^2(t-1), & 1 \leq t \leq 2, \\ 0, & t \notin [0, 2]. \end{cases}$$

Двухмасштабные соотношения можно получить в виде:

$$\varphi_0(t) = \frac{1}{2}\varphi_0(2t) + \varphi_0(2t-1) + \frac{1}{2}\varphi_0(2t-2) + \frac{3}{4}(\varphi_1(2t) - \varphi_1(2t-2)),$$

$$\varphi_1(t) = \frac{1}{2}\varphi_1(2t-1) - \frac{1}{8}\varphi_1(2t) - \frac{1}{8}\varphi_1(2t-2) - \frac{1}{8}(\varphi_0(2t) - \varphi_0(2t-2)).$$

Базисные вейвлеты образуют дополнение пространства сплайнов на прореженной сетке до пространства сплайнов на густой сетке:

$$\psi_0(t) = -2\varphi_0(2t) + 4\varphi_0(2t-1) - 2\varphi_0(2t-2) - 21\varphi_1(2t) + 21\varphi_1(2t-2),$$

$$\psi_1(t) = \varphi_0(2t) - \varphi_0(2t-2) + 9\varphi_1(2t) + 12\varphi_1(2t-1) + 9\varphi_1(2t-2).$$

Для вейвлет-преобразования узловых значений эрмитового сплайна и его производных получены две независимые трехдиагональные системы уравнений со строгим преобладанием. Аналогично, вейвлет-преобразование эрмитовых

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ по проекту 10-07-90901 моб_снг_ст.

сплайнов пятой степени расщепляется на 3 трехдиагональные системы и т.д. Это очень привлекательно для распараллеливания решения задачи сжатия сплайн-кривых на многоядерных процессорах с использованием технологии OpenMP.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВИЖЕНИЯ ГРАНУЛИРОВАННОЙ СРЕДЫ НА ОСНОВЕ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ

Богульский И.О., Богульская Н.А.

*Институт вычислительного моделирования СО РАН
Сибирский федеральный университет*

Ранее задача о движении гранулированной среды в вибрирующих сосудах сводилась к пошаговому пересчету параметров гранул (координат, скоростей и т.д.), изменяющихся в процессе взаимодействия друг с другом и стенками сосуда, и визуализации результатов. При этом учитывались размеры гранул, их податливость, коэффициенты трения, технологические характеристики вибрирующего устройства. Численное решение строилось на основе многостадийного одношагового метода [1].

Компьютерное моделирование было выполнено в среде DELPHI. В работе предлагается распараллеливание процесса пересчета параметров движения гранул. Этот пересчет параметров на каждом шаге по времени требует большого объема вычислений.

В операционной 32-разрядной системе Windows предусмотрена возможность организации в среде DELPHI нескольких потоков. Для организации многопоточности использует-

ся объект Object Pascal – TThread.

Использование многопоточности при проведении вычислений обязательно предполагает синхронизацию. Визуализация результатов вычислений проводится всегда в основном потоке при закрытии всех вторичных. Проблема синхронизации возникает и при однопоточной реализации имитационной модели, так как приходится согласовывать выполнение двух процессов – пересчета параметров гранул и визуализации.

Многопоточность дает эффект только на многопроцессорных компьютерах.

Литература

- [1] Богульская Н.А., Богульский И.О., Вишняков А.А. Имитационный подход к моделированию движения гранулированных сред // Вестник КрасГАУ, 2005. № 9. С. 214–218.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ CFD КОДА SIGMAFLOW

Бойков Д.В.¹, Гаврилов А.А.², Дектерев А.А.², Минаков А.В.^{2,3},
Сентябов А.В.^{2,3}

¹ООО ТОРИНС

²Институт теплофизики СО РАН

³Сибирский федеральный университет

Решение современных задач гидро-газодинамики и теплообмена зачастую требует больших вычислительных ресурсов. На данный момент в мире существует достаточно большое количество зарубежных “универсальных” коммерческих про-

граммных продуктов, позволяющих проводить моделирование гидродинамических и теплофизических процессов, таких как STAR-CD, Fluent, CFX и др. Любой из них содержит параллельную реализацию, позволяющую осуществлять расчеты на высокопроизводительных вычислительных системах. Однако стоимость таких решений высока и практически линейно зависит от необходимого количества ядер. В связи с этим разработка и развитие собственных программ для параллельных вычислений является актуальной задачей.

В данной работе представлены результаты применения программного комплекса SigmaFlow для параллельных вычислений. Программа SigmaFlow – это универсальный некоммерческий программный продукт для решения широкого класса задач гидродинамики, тепломассообмена и горения, развиваемый специалистами Красноярского филиала института теплофизики СО РАН, кафедры теплофизики Сибирского федерального университета и ООО “ТОРИНС”.

Параллельные вычисления в данном коде реализованы посредством декомпозиции расчетной области, обмен информации между областями осуществляется посредством стандарта MPI, для разбиения расчетной сетки используется библиотека MeTiS. Помимо существующей Windows версии, была реализована Linux версия пакета для расчета на высокопроизводительных системах.

Проведено тестирование кода на кластере Сибирского федерального университета и на кластере из четырех машин на базе четырех ядерных процессоров core i7 с частотой 3800 МГц. Выявлены некоторые особенности зависимости эффективности распараллеливания от способа распределения нагрузки по узлам.

Разработанный код применялся для решения ряда прикладных задач. В частности, рассматривалась прецессия вих-

ревого ядра за рабочим колесом гидротурбины. Разрешение эволюции крупномасштабных вихрей в нестационарных расчетах требует использования детальных расчетных сеток и малых шагов по времени, вследствие чего необходимо использование многопроцессорных вычислений. Полученные в результате моделирования частота прецессии и величина пульсаций давления согласуются с экспериментальными данными и расчетами других авторов.

Еще одной из задач, решаемой с применением пакета SigmaFlow на многопроцессорных системах, было прямое численное моделирование смешения жидкостей в микроканалах. Расчет процесса смешения жидкостей в каналах микронного размера является чрезвычайно актуальной и сложной задачей. Основная сложность здесь состоит в аккуратном разрешении слоя смешения вплоть до бэтчелоровского масштаба, поэтому приходится применять очень детальные расчетные сетки. В данной работе для расчетов использовалась равномерная расчетная сетка из 10 млн. узлов. Время расчета процесса смешения для числа $Re = 600$ на такой сетке на кластере из 100 ядер составило 2,5 недели. Показано хорошее согласование расчетных результатов с экспериментальными данными, как по интегральным, так и по локальным характеристикам процесса смешения.

ПЛАНИРОВАНИЕ СХЕМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ В ИНТЕГРИРОВАННОЙ КЛАСТЕРНОЙ СИСТЕМЕ

Вартамян Э.К.

Иркутский государственный университет

К настоящему времени разработаны различные методы и средства управления распределенными вычислениями. Тем не менее, проблема планирования расчетов и загрузки ресур-

сов в *распределенных вычислительных средах* (РВС) остается актуальной. Выполнение этих процессов в режиме реального времени обуславливает необходимость сравнительного анализа алгоритмов планирования вычислений с целью определения алгоритма, удовлетворяющего заданным требованиям к эффективности его работы.

В Институте динамики систем и теории управления СО РАН ведутся активные исследования в области организации высокопроизводительных параллельных и распределенных вычислений [1]. Данные исследования показывают, что использование средств искусственного интеллекта является ключевым фактором в создании удобных информационно-вычислительных сред для прикладных специалистов, нацеленных на эффективное применение высокопроизводительных ресурсов при осуществлении сложных многоэтапных расчетов в процессе решения своих задач. Проведение такого рода расчетов требует, как правило, частичного упорядочения (планирования) множества взаимосвязанных подзадач — построения схемы решения задачи (СРЗ). В этом направлении в институте разрабатывается система управления распределенными вычислениями, базирующаяся на использовании многоагентных технологий. Основу данной системы составляют интеллектуальные агенты двух типов: интеллектуальные агенты планирования СРЗ и интеллектуальные агенты выполнения СРЗ.

В докладе рассмотрены алгоритмы функционирования интеллектуального агента планирования СРЗ в интегрированной кластерной системе. Проведен сравнительный анализ различных моделей представления знаний об интегрированной кластерной системе, а также алгоритмов планирования СРЗ и алгоритмов построения множества интеллектуальных агентов выполнения СРЗ (виртуальное сообщество). На ос-

нове проведенного анализа разработаны алгоритмы, обеспечивающие: планирование СРЗ за время, удовлетворяющее заданным ограничениям; формирование множества агентов выполнения СРЗ и построение топологической схемы коммуникации между ними древесного типа; введение необходимой и достаточной вычислительной избыточности, обеспечивающей выполнение СРЗ с заданной степенью вероятности. Выполнена программная реализация прототипа интеллектуального агента планирования схем решения задач.

Литература

- [1] Бычков И.В., Опарин Г.А., Новопашин А.П., Феокистов А.Г., Корсуков А.С., Сидоров И.А. Высокопроизводительные вычислительные ресурсы ИДСТУ СО РАН: Текущее состояние, возможности и перспективы развития // Вычислительные технологии, 2010. Т. 15, № 3. С. 69–82.

**КОМПЛЕКС ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ
ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ
РАСПРОСТРАНЕНИЯ УПРУГИХ ВОЛН
В МОМЕНТНЫХ СРЕДАХ
НА МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ ¹**

Варыгина М.П.

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Технологии распределенных вычислений оказываются эффективными при решении пространственных задач механики сплошных сред. Это, прежде всего, касается задач, решаемых на мелких сетках, а также, если расчетная область обладает сложной структурой – содержит большое число внутренних поверхностей раздела, жестких включений. Модель Коссера – одна из математических моделей механики сплошной среды, в которой учитывается микроструктура материала. В отличие от классической теории упругости, в этой модели каждая материальная точка наделяется свойствами твердого тела – для нее учитываются вращательные степени свободы. Модель Коссера служит для описания напряженно-деформированного состояния структурно неоднородных материалов: композитов, гранулированных и сыпучих сред.

При численном решении задач деформирования в рамках теории Коссера необходимо согласовывать размер ячеек используемых сеток с характерным размером неоднородности, представляющим собой малую величину. В результате дискретизации получаются задачи большой размерности, для

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 08-01-00148) и Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 40.

реализации которых недостаточно вычислительных ресурсов персонального компьютера или рабочей станции с последовательной архитектурой.

Создан комплекс прикладных программ, предназначенный для численного моделирования пространственных волновых движений в моментной теории упругости на многопроцессорных вычислительных системах. Параллельный алгоритм основан на методе двуциклического расщепления по пространственным переменным в сочетании с явной монотонной ENO-схемой типа “предиктор–корректор” (обобщение схемы распада разрыва Годунова). Алгоритм реализован на языке Fortran с использованием библиотеки MPI (Message passing interface). Распараллеливание выполнено на основе блочного разбиения области решения задачи. Верификация комплекса программ выполнена сравнением численного и аналитического решения задачи о распространении поверхностной волны Рэлея в полной и редуцированной среде Коссера.

Представлены результаты расчетов плоских и пространственных динамических задач о действии распределенной периодической импульсной нагрузки, задач о резонансном воздействии, задач Лэмба о мгновенном действии сосредоточенных сил и моментов на поверхности полупространства [1-3].

Литература

- [1] Садовская О.В., Садовский В.М. Математическое моделирование в задачах механики сыпучих сред. М.: Физматлит, 2008. 368 с.
- [2] Садовский В.М., Садовская О.В., Варыгина М.П. Численное моделирование пространственных волновых дви-

жений в моментных средах // Вычислительная механика сплошных сред, 2009. Т. 2, № 4. С. 111–121.

- [3] Варыгина М.П., Садовская О.В., Садовский В.М. О резонансных свойствах моментного континуума Коссера // Прикладная механика и техническая физика, 2010. Т. 51, № 3. С. 126–136.

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДВИЖЕНИЯ ВОЗДУХА И ПЕРЕНОСА ПАССИВНОЙ ГАЗООБРАЗНОЙ ПРИМЕСИ В УЛИЧНЫХ КАНЬОНАХ

Данилкин Е.А., Старченко А.В.

Томский государственный университет

Работа посвящена актуальной проблеме моделирования переноса примеси в уличных каньонах. В настоящее время математическое моделирование широко используется в различных областях науки и техники, все глубже проникая во все сферы жизнедеятельности человека. А с ростом внимания к проблемам экологии современного города актуальной становится задача разработки математических моделей для описания переноса примеси в городских кварталах.

В работе представлена параллельная реализация алгоритма численного решения системы уравнений Навье–Стокса, описывающих движение несжимаемой среды при моделировании турбулентности методом крупных вихрей. Метод крупных вихрей или вихреразрешающее моделирование рассмат-

ривается как альтернатива распространенному методу решения уравнений Навье–Стокса, осредненных по Рейнольдсу. Вихреразрешающее моделирование турбулентности позволяет описывать нестационарные течения, более точно предсказывая поведение потока за плохообтекаемыми телами.

При реализации вихреразрешающего моделирования турбулентности особое внимание необходимо уделять схемам аппроксимации конвективных и нестационарных слагаемых, используемым при получении дискретного аналога уравнений переноса для компонент скорости. В работе проведено сравнение трех схем второго порядка аппроксимации: противопотоковой схемы MLU Ван Лира, схемы Леонарда QUICK, центрально-разностной схемы второго порядка и центрально-разностной схемы четвертого порядка. Показано, что наиболее точные результаты для выбранных тестовых задач можно получить при использовании схемы QUICK в сочетании с подсеточным замыканием динамического типа [1].

Предложенная математическая модель применена для исследования аэродинамики потока и переноса примеси в элементах городской застройки. Проведено исследование влияния соотношения ширины и высоты уличного каньона, расположения источника примеси и скорости потока воздуха на структуру течения и распространение концентрации примеси. Выявлено существование трех режимов циркуляции воздуха внутри каньона в зависимости от его геометрических параметров.

Вихреразрешающее моделирование предъявляет достаточно жесткие требования к быстродействию компьютера, поэтому в работе сделан упор на использование многопроцессорной вычислительной техники с распределенной памятью, рассмотрены различные способы геометрической декомпозиции (одномерная, двумерная и трехмерная) и на характерных

для рассматриваемой задачи сетках показано преимущество двумерной декомпозиции сеточной области [2].

Литература

- [1] Данилкин Е.А., Старченко А.В. Параллельная реализация численного метода решения системы уравнений Навье–Стокса при моделировании крупных вихрей турбулентных течений // Вестник Новосибирского государственного университета. Сер. Информационные технологии, НГУ. 2009. Т. 7, № 2. С. 49–61.
- [2] Данилкин Е.А. К вопросу об эффективности 3D-декомпозиции при численном решении уравнения переноса с использованием МВС с распределенной памятью // Вестник ТГУ. Механика и математика. 2008. № 2 (3). С. 39–46.

NUMERICAL SOLUTION OF ASSIMILATION DATA PROBLEM FOR SHALLOW WATER EQUATIONS ¹

Dementyeva E.V., Karepova E.D.

Institute of Computational Modeling SB RAS

There are many phenomena which are described in the context of shallow water models, for example, large-scale surface ocean wave, tidal flow, tsunami, surface and channel run-off, gravity oscillations of ocean, and many others. This work is devoted to numerical modeling of surface wave in large water area

¹The work was supported by Russian Foundation of Basic Research (grant 08-01-00621-a).

taking into account the sphericity of the Earth and Coriolis acceleration. The boundary problem for shallow water equations is set in a domain with two kinds of part of the boundary: “solid” for the coastal contour and “liquid” for the sea boundary. In the complete task the boundary conditions contain unknown function. We can find this function together with velocities and sea surface. The additional condition connected with obtain data is used to close the problem. To solve inverse problem the methodology by Prof. V.I. Agoshkov is used. This approach is based on optimal control methods and adjoint equations theory.

The discrete problem is obtained on the special compatible triangulation. The Bubnov–Galerkin method is used for the approximation with respect to space. Linear functions on triangular finite elements are used as trial and test functions. A priori stable estimations are derived for discrete analogue. The second order of approximation in internal nodes was shown.

The numerical experiments were carrying out for the test problem with known exact solutions and for sea of Okhotsk and World Ocean.

Using FEM we obtain a system of linear algebraic equations which has a great dimension for real computational domain. Hence the high performance computation is necessary to solve it. For construct parallel algorithm we use an explicit potential of data parallelism for our discrete problem. In this work efficiency is compared for some parallel realizations of an algorithm for the numerical solution of the boundary-value problem which were performed with the help of the MPI library for C language. Two approaches are considered to the decomposition of a computational domain and two schemes of communications.

The theoretical estimates show that the algorithm has a good structure from the parallelizing point of view and provides acceleration closed to linear one depending on the number of pro-

processors being used.

Results concerning acceleration of computations depending on the number of processes, the type of communication realization, the method of the decomposition of a computational domain, and the architecture of high performance cluster system are presented.

Numerical experiments show that the non-blocking communication mode, which is allowed in the algorithm, is undoubtedly more effective. Further improvement of algorithm efficiency, for example, due to combination of calculations and non-blocking communications, is in progress.

It should be noticed that an advantage of the algorithm is simple organization of decomposition without shadow lines on non-structured triangulations for actual water basins.

The calculations were performed with three high-performance computational systems of different architecture. It is revealed the advantage of homogeneous structure (of the SKIF Cyberia Tomsk University cluster and HP-cluster from Novosibirsk University) over heterogeneous one (developed in ICM SB RAS) was demonstrated. In addition, unstable acceleration is shown for heterogeneous structure of a cluster, which is inherent neither in the algorithm nor in the implementation.

МИРОВЫЕ ТРЕНДЫ НРС

Ермаков В.Н.

Сибирский федеральный университет

В то время как внимание абсолютного большинства членов IT-сообщества приковано с мая 2005 года к увеличению числа ядер в процессорах корпораций Intel, AMD и IBM, лишь единицы знают о результатах разработок, которые ведутся в Японии и Китае экспериментальной инженерной группой Токийского университета и Институте компьютерных технологий академии наук Китая, соответственно.

Последние несколько лет ведущие мировые державы и те, кто желают потеснить их, одержимы идеей создания суперкомпьютера с реальной производительностью эксафлопсного уровня. Очередным, но решающим толчком к новой гонке технологий послужил отзыв жалобы компании Cray на японскую компанию NEC по поводу продажи последней по демпинговым ценам на американском рынке ее векторных суперкомпьютеров 27 февраля 2001 года. Получив 25 млн. долл. и монопольное право на продажу японских вычислителей, Cray, по сути, признала несостоятельность промышленности США обеспечить собственную национальную безопасность.

Чтобы устранить нарушенный паритет с Японией в области высокопроизводительных вычислений, Министерство обороны США реализует сегодня программу (DARPA HPCS) создания суперкомпьютеров с перспективной архитектурой для решения стратегически важных государственных задач обеспечения национальной безопасности. Тогда как страны Востока уже ведут собственные активные исследования и разработки в области суперкомпьютеров стратегического назначения (СКСН).

Китай в рамках реализуемой Министерством науки и технологий национальной программы 863/ИТ, начатой еще в марте 1986 года, разработал семейство процессоров Loongson (Godson) с чрезвычайно высокой производительностью и одновременно минимальным энергопотреблением. Параллельно был разработан 20 ядерный потоковый процессор FT64, в последствии интегрированный в MASA. А это означает возможность построения СКСН, которым не страшна проблема “стены памяти”.

Однако, еще в 2006 году японскими учеными был создан процессор GRAPE-DR с поистине рекордными показателями (см. Таблица 1). Но главные его преимущества – тактовая частота, низкие технологические нормы и запас времени: надеяться на бездействие Японии – утопия.

Таблица 1. Сравнительная таблица процессоров.

Характеристики:	GRAPE-DR:	NVIDIA G92:	AMD FS9170:	Intel Xeon 5365:	FT64:	MASA:	Loongson-3:
год выпуска	2006	2008	2007	2006	2007	2009	2010
тех. процесс, нм	90	65	55	65	130	45	65
частота, ГГц	0.5	1.5	0.8	3	0.5	1	1
количество ядер	512	112	320	4	20	160	8
SP, Гфлопс	512	336	512	48	16	512	128
мощность, Вт	65	70	150	120	8.6	~70	20
Гфлопс/Вт	7.88	4.8	3.41	0.4	1.86	~7.31	6.4

Достигнуть эксафлопсного уровня западному миру, конечно, удастся, но как всегда числом, а не умением. Скорее всего, это будут гетерогенная система с множеством графических ускорителей. Тогда как Китай и/или Япония, возможно, создадут гетерогенный СКСН на базе массивно-

мультитредовых и потоковых микропроцессоров собственного производства, толерантный к задержкам выполнения операций с огромной глобально адресуемой пространственно распределенной памятью.

Литература

- [1] Godson can stimulate domestic IT industry into a key victory [Электронный ресурс]. 2010. Режим доступа: <http://www.lupaworld.com/viewnews-202831.html>
- [2] K&F Computing Research Co [Электронный ресурс]. 2010. Режим доступа: <http://www.kfcr.jp>
- [3] Makino J. GRAPE-DR and Next-Generation GRAPE. Japan: Center for Computational Astrophysics and Division Theoretical Astronomy National Astronomical Observatory of Japan, 2009. 51 с.
- [4] Волков Д. Стратегические ИТ: китайский сюрприз № 863. Открытые системы. [Электронный ресурс]. 2010. Режим доступа: <http://www.osp.ru/os/2010/03/13001879/>

О РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИИ РАСЧЕТОВ В ЗАДАЧАХ ДИНАМИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ ¹

Каменщиков Л.П.

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В докладе рассматривается ряд методов распараллеливания при расчетах классических (ньютоновских) траекторий движения взаимодействующих материальных частиц, находящихся также под действием некоторого внешнего силового поля. Модель сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для координат частиц и их скоростей: $\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$, $m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i$, $i = 1, \dots, N$. Интерпретация самого понятия “частица”, задание вектора силы \mathbf{F}_i , интервала интегрирования и другие детали в модели зависят от конкретной области приложений. Метод частиц широко применяется при компьютерном моделировании в молекулярной биологии и химии для исследования структуры и динамики макромолекул [1–4], в механике жидкостей, газов и твердых тел [5], в физике электрон-ионной плазмы [6] и т.п. Макроскопические свойства системы определяются усреднением состояний отдельных частиц по всей системе. Преимущество метода частиц в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах изучаемого материала, чем методы, основанные на концепции сплошной среды [5].

Вектор \mathbf{F}_i обычно является суммой близкодействующих и дальнедействующих сил. В типичных приложениях около 90% машинного времени занимает нахождение дальнедействующих сил [3], расчет которых и распараллеливается в

¹Работа поддержана РФФИ, грант № 08-01-00621.

первую очередь. Представлены особенности следующих методов распараллеливания: 1) декомпозиция частиц – каждый процессор решает уравнения только для некоторого подмножества всех частиц; 2) декомпозиция сил – каждый процессор вычисляет только некоторое подмножество из всего набора сил $\{\mathbf{F}_i\}$; 3) пространственная декомпозиция – пространство разбивается на ячейки, каждая ячейка приписывается какому-то процессору, который и следит за поавшими в эту ячейку частицами; 4) гибридные методы.

Трудности распараллеливания довольно значительны при работе на стандартных кластерах с распределенной памятью. Однако в последние годы широкое распространение получают многоядерные процессоры с общей памятью (мультипроцессоры). Задача распараллеливания при этом существенно упрощается. В докладе приводятся примеры решения модельных задач молекулярной динамики на восьмиядерных процессорах Intel Xeon, 3.0 GHz, 4 Gb памяти (МСЦ РАН) с использованием стандарта OpenMP.

Литература

- [1] Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation: From algorithms to applications, 2nd edition. N.-Y.: Academic Press, 2002.
- [2] Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation, 2nd edition. Cambridge Univ. Press, 2004.
- [3] Tarmyshov K.B., Müller-Plathe F. Parallelizing a Molecular Dynamics Algorithm on a Multiprocessor Workstation Using OpenMP // J. Chem. Inf. Model. 2005. V. 45. P. 1943–1952.
- [4] Мансури Г.А. Принципы нанотехнологии. Пер с англ. М.: Научный мир, 2008.

- [5] Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал, 2002. Т. 3, № 2. С. 254–276.
- [6] Gavriliuk A.P., Isaev I.L., Karpov S.V., Krasnov I.V., Shaparev N.Ya. Brownian dynamics of laser cooling and crystallization of electron-ion plasma // Physics Review E80, 056404, 2009.

МЕТОДЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕСУРСОВ В МНОГОАГЕНТНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СРЕДЕ

Кантер А.Н.

Иркутский государственный университет

Распределение ресурсов в разнородной распределенной вычислительной среде для решения ресурсоемких задач представляет собой сложную проблему. К настоящему времени разработан целый ряд алгоритмов распределения ресурсов, но они, как правило, не учитывают политики администрирования узлов, входящих в распределенную систему, и предназначены для распределения потока не связанных между собой задач. В этой связи возникает необходимость разработать новые алгоритмы.

В Институте динамики систем и теории управления СО РАН ведутся интенсивные исследования [1], связанные с разработкой средств и методов организации интегрированной кластерной системы, объединяющей территориально и административно распределенные вычислительные кластеры.

Управление вычислительными ресурсами интегрированной кластерной системы реализуется на основе многоагентного подхода.

В данном докладе рассматриваются принципы работы интеллектуальных агентов выполнения схем решения задач, в частности – методы распределения ресурсов в разнородной распределенной вычислительной среде, базирующиеся на многоагентном подходе. Сравниваются различные алгоритмы выбора координатора (агента, осуществляющего организационную деятельность), в том числе волновые, топологические и др. Анализируются методы проведения торгов между агентами с целью распределения ресурсов по задачам и подзадачам. Автором доклада разработан алгоритм, на основании которого агент определяет желаемую степень своего участия в вычислении той или иной задачи. В основе алгоритма лежит продукционная модель представления знаний. Использование этого алгоритма [2] обеспечивает как учет политики администрирования узлов, так и потребностей системы в целом.

Литература

- [1] Бычков И.В., Опарин Г.А., Новопапин А.П., Феоктистов А.Г., Корсуков А.С., Сидоров И.А. Высокопроизводительные вычислительные ресурсы ИДСТУ СО РАН: Текущее состояние, возможности и перспективы развития // Вычислительные технологии, 2010. Т. 15, № 3. С. 69–82.
- [2] Кантер А.Н. Методы распределения ресурсов в многоагентной вычислительной среде // Вестник Иркутского Университета: Ежегод. науч.-теорет. конф. аспирантов и студентов: материалы. Иркутск: Изд-во Иркут. гос. ун-та, 2010 (в печати).

СРАВНЕНИЕ РЕАЛИЗАЦИЙ MPI: УПРАВЛЕНИЕ ПАМЯТЬЮ, ОБМЕНЫ ДАНЫМИ В SMP-УЗЛОВЫХ КЛАСТЕРАХ

Каропова Е.Д.¹, Дементьева Е.В.², Малышев А.В.¹

¹*Институт вычислительного моделирования СО РАН*

²*Сибирский федеральный университет*

Данная работа посвящена изучению некоторых аспектов эффективного использования кластерных систем на примере распараллеливания реализации метода конечных элементов для численного решения начально-краевой задачи для уравнений мелкой воды.

В процессе разработки параллельного программного обеспечения (ПО) для решения рассматриваемой задачи мы столкнулись с некоторыми трудностями, обусловленными недостатком информации об эффективности того или иного способа решения частных подзадач. В связи с этим, было проведено исследование, результаты которого относятся не столько к самой задаче, сколько к инструментам, с помощью которых она решается. В частности, была сопоставлена эффективность двух широко распространенных реализаций стандарта MPI, исследовано поведение нашего ПО при использовании различных способов выделения памяти, а также обнаружено несколько интересных эффектов, возникающих при измерении и оценке затрат на обмен данными между вычислительными процессами.

**ПЕРСПЕКТИВЫ ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЙ
ПРИ ДИСТАНЦИОННОМ ЗОНДИРОВАНИИ
ЗЕМЛИ НА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ УСТРОЙСТВАХ
ПО АЛГОРИТМАМ СИНГУЛЯРНОГО
СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА
И ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ**

Кашкин В.Б.¹, Перетокин С.А.¹, Марчук Ан.Г.², Симонов К.В.³

¹*Сибирский федеральный университет*

²*Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН*

³*Институт вычислительного моделирования СО РАН*

Сингулярный спектральный анализ (ССА) временных рядов, также как и вейвлет-преобразование, нашли широкое применение в геофизике при исследовании параметров вращения Земли, землетрясений, атмосферных явлений, в экологии, в экономике, медицинских и других приложениях. В работе используется модификация метода ССА “Гусеница”, разработанная в Санкт-Петербургском университете, а также разработанный авторами алгоритм быстрого вейвлет-преобразования пространственно-временных рядов.

Изображение, в частности космический снимок поверхности Земли, можно рассматривать как многомерный ряд, состоящий из отдельных строк. В качестве варианта метода ССА применительно к изображениям используется отдельно обработка по строкам, а затем по столбцам. Правильный выбор результирующих главных компонентов позволяет выполнять предварительную обработку изображения, например, удалять шум на изображении, выделять многомерный тренд, выделять или устранять периодические структуры на

изображении и т.п. ССА эффективен также при тематической обработке, на его основе могут быть разработаны новые методы распознавания образов, например, метод обнаружения очагов пожаров на космических снимках, методы классификации изображений лесных территорий, методы анализа сельхозугодий, методы экологического мониторинга. Важной особенностью метода ССА является возможность устранения краевых искажений, типичных для обычных фильтров.

Для обработки изображений с использованием ССА, также как и для пространственного вейвлет-преобразования, требуются значительные вычислительные ресурсы и временные затраты. Если иметь в виду обработку изображений, то метод ССА и разработанный алгоритм вейвлет-преобразования идеально подходят для параллельных вычислений. Каждая строка и каждый столбец или группа строк (столбцов) могут быть обработаны отдельно, и анализ изображений большого формата, в том числе многоспектральных, не потребует большого времени.

Примеры использования ССА. В работе анализируются изображение участка Тахома–Ерубчанского месторождения углеводородного топлива (формат 200x200 пикселей), полученное с помощью космического аппарата LANDSAT с разрешением 30 м, и гистограмма этого изображения. Целью обработки является выделение контура реки. Гистограмма не имеет ярко выраженных мод, поэтому пороговая сегментация (бинаризация) не приводит к желаемому результату. Метод сингулярного спектрального анализа и пакет *Caterpillar SSA 3.3* хорошо зарекомендовали себя при выделении трендов временных рядов. Фон является двумерным трендом изображения и в нашем случае неравномерен, так как часть изображения находится в тени гор. Выполнено вначале сингулярное разложение изображения по строкам, после этого

– по столбцам. Компоненты, относящиеся к трендам, удалялись. В результате преобразования исходного изображения удалось выделить контур реки с лучшим качеством.

Примеры использования вейвлет-преобразования. В отличие от земной суши, следы падения крупных небесных тел на океаническом дне значительно сложнее обнаружить. Это происходит вследствие более интенсивного процесса эрозии, а также сокрытия морфологии таких структур донными отложениями. К настоящему времени обнаружено всего несколько достоверных импактных структур на дне океана, хотя, принимая во внимание соотношение площадей Земной суши и океанов, таковых должно быть значительно больше. Кроме морфологических импактным кратерам присущи и некоторые геофизические признаки. В частности, анализ имеющихся данных по достоверным структурам и моделирование самого процесса соударения астероида с Земной корой позволяют утверждать, что метеоритный кратер характеризуется отрицательной аномалией гравитационного поля. Для “молодых” структур характерны также аномалии магнитного поля. Этот факт позволяет обнаруживать скрытые или донные метеоритные кратеры путем анализа гравитационного и магнитного полей Земли. Цифровые данные земного рельефа или гравитационного поля представляют собой матрицу $N \times M$ элементов, которые содержат значения возвышения над уровнем моря или отклонение гравитационного поля от некоторого среднего значения в узлах прямоугольной координатной сетки.

Алгоритм вейвлет-преобразования тестировался на известных импактных структурах на Земной поверхности и кратере Буркле на дне Индийского океана. Кратер Буркле (30.865 ю.ш. и 61.365 в.д.): расположен в Индийском океане на глубине 3800 м с диаметром 29 км в полутора тысячах

километров к юго-востоку от о. Мадагаскара в виде кольцевой структуры. В результате обработки данных по кратеру Бюркле после соответствующих этапов фильтрации отчетливо выделяется искомый кратер.

Таким образом, в работе на примере анализа пространственных геофизических данных показана возможность использования сингулярного спектрального анализа и вейвлет-преобразования для анализа изображений, поиска скрытых кольцевых структур импактного происхождения и выявления их особенностей.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ГЕОМОНИТОРИНГА НА КЛАСТЕРАХ

Кириллова С.В.¹, Перетокин С.А.¹, Симонов К.В.²

¹*Сибирский федеральный университет*

²*Институт вычислительного моделирования СО РАН*

Одной из основных задач инженерной сейсмологии в настоящее время является оценка сейсмостойкости строительных конструкций. Для решения этой задачи производится детальное изучение стоячих волн, возникающих в инженерном сооружении (методика разработана в ГС СО РАН, В.С. Селезнев, А.Ф. Еманов). Так как геометрическая форма стоячей волны, фаза и частота собственных колебаний зависят только от индивидуальных характеристик инженерного объекта, то такие исследования позволяют выявлять дефекты и ослабленные места конструкции.

Для обследования инженерного сооружения применяется следующая система наблюдения: производится одновремен-

ная регистрация колебаний здания под воздействием микросейсмических колебаний в опорной точке (группе опорных точек) и i -ой точке (группе точек), затем i -я точка (группа точек) меняет свое положение и вновь проводится регистрация сейсмических колебаний одновременно с неизменными опорными точками. Таким способом наблюдениями можно детально покрыть исследуемый объект с малоканальной аппаратурой. Далее задача состоит в преобразовании разновременных наблюдений в “мобильных” точках регистрации в одновременную запись стоячих волн на всей системе наблюдения.

Произведен эксперимент, целью которого являлась обработка и автоматизация технологии выделения собственных частот зданий и сооружений на основе пересчета стоячих волн. Работа проводилась специалистами отдела геодинамических и экологических рисков СКТБ “Наука” КНЦ СО РАН в восточном крыле здания. В ходе эксперимента произведены следующие действия.

1. Выполнена регистрация микросейсмических колебаний стены здания группами из шести трехкомпонентных регистраторов по схеме с двумя опорными точками девятью установками.

2. Построены фильтры, обеспечивающие пересчет стоячих волн из двух опорных точек в i -ю. Для этого реализован расчетный модуль в среде Mathcad. При этом записи разбивались на n независимых блоков ($n = 112$, длина блока 16.384 с). Такая сегментация принята для автоматизации расчетов и использования функции быстрого преобразования Фурье (fft) в Mathcad, оперирующей рядами данных длиной 2^n . Быстрое преобразование Фурье каждого блока осуществляется независимо.

3. Осуществлен пересчет выбранной записи колебаний из опорных точек во все i -е с использованием построенных двухканальных фильтров. На этом этапе расчеты также производятся независимо друг от друга.

Таким образом, представленная методика пересчета стоячих волн позволяет покрывать исследуемый объект малым количеством регистрирующих устройств, при этом возможность распараллеливания вычислений повышает эффективность алгоритма. В работе представлены разработки информационного и алгоритмического обеспечения для решения поставленной прикладной задачи на кластерах.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАКЕТА PETSC ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СЖАТИЯ СПЛАЙН-КРИВЫХ ¹

Кудуев А.Ж., Шумилов Б.М., Эшаров Э.А., Матанов Ш.М.
Ошский государственный университет

Проблема вейвлет-разложения эрмитовых кубических сплайнов сводится к решению ленточной системы уравнений. Матрица этой системы не вырождена, однако хорошую обусловленность обосновать невозможно. Поэтому в руководстве [1] рекомендуется использовать для решения такого рода систем предобусловливатели. На кластере СКИФ Cyberia [2] имеется пакет PETSc, включающий в себе такие возможности, как: работу с векторами и матрицами; создание параллельных версий программ без написания большого коли-

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ по проекту 10-08-90903 моб_снг_ст.

чества явных процедур передачи сообщений самостоятельно; контроль хода решения задачи во время исполнения программы без какого-либо дополнительного пользовательского программного кода; большой выбор предобусловливателей для итерационного решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений.

PETSc использует стандарт MPI для межпроцессорных обменов, что позволяет включать в PETSc-программы процедуры MPI. Однако пользователь изолирован от деталей передачи сообщений внутри параллельных объектов (векторов, матриц).

В докладе представлены результаты численных экспериментов по вейвлет-сжатию эрмитовых кубических сплайн-кривых на кластере.

Литература

- [1] Столниц Э., ДеРоуз Т., Салезин Д. Вейвлеты в компьютерной графике: Пер. с англ. Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2002. 272 с.
- [2] Беликов Д.А., Говязов И.В., Данилкин Е.А., Лаева В.И., Проханов С.А., Старченко А.В. Высокопроизводительные вычисления на кластерах. Учеб. пос. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2008. 198 с.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ
ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ
ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ
ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ МЕТОДОМ
РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА
ДВУХФАЗНЫХ СИСТЕМ ¹**

Куперштох А.Л.

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН

Для компьютерного моделирования эволюции систем с границами раздела фаз жидкость-пар используется метод решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE) [1,2], который в настоящее время широко применяется для моделирования течений жидкости, включая многофазные и многокомпонентные [3-5]. Метод LBE представляет собой дискретную модель сплошной среды. В отличие от классических методов расчета течений жидкости путем решения уравнений Навье–Стокса метод решеточных уравнений Больцмана рассматривает течение как движение ансамбля псевдо-частиц, имеющих некоторую функцию распределения по дискретным скоростям. Обоснованием метода LBE является тот факт, что во втором порядке разложения Чепмена–Энскога из уравнений LBE получаются макроскопические уравнения гидродинамики, то есть уравнения неразрывности и Навье–Стокса. В настоящее время метод LBE вполне может конкурировать с традиционными методами, а в некоторых областях (течения в пористой среде, многофазные и многокомпонентные) он имеет значительные преимущества. Реализована двумерная модель LBE – D2Q9

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 10-08-00805) и интеграционного проекта СО РАН № 58-2009.

с учетом фазовых переходов.

Графические процессоры на видеокартах – Graphical Processing Unit (GPU) специально разрабатывались для быстрой обработки больших объемов графических данных. Алгоритм ЛВЕ включает в себя вычисления преимущественно в локальном узле, за исключением переноса частиц и силы взаимодействия между узлами, что позволяет распараллелить вычисления на большое количество процессоров. Впервые GPU были использованы для моделирования методом ЛВЕ в работе [6]. Последние модификации бюджетных видеокарт фирмы nVIDIA GTX-285 и GTX-480 имеют по 240 и 480 параллельных потоковых процессоров (ядер), соответственно. Все ядра имеют доступ к относительно быстрой общей внутренней памяти, объем которой для GTX-285 и GTX-480 составляет 1 и 1.5 Гигабайта, соответственно. Распараллеливание основано на создании сотен миллионов потоков, которые выполняются одновременно на всех свободных ядрах. Для варианта метода ЛВЕ с фазовыми переходами ускорение нашего алгоритма для GTX-480 составляло до 60-80 раз при вычислениях с двойной точностью по сравнению с одним ядром процессора Intel Core 2 Duo с частотой 3.3 ГГц. Для двумерных расчетов использовались сетки размерами до 3600×3600 .

В докладе приводятся примеры решения ряда задач с границами раздела фаз с использованием технологии программирования CUDA.

Литература

- [1] McNamara G.R., Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // Phys. Rev. Lett., 1988. V. 61, № 20. P. 2332–2335.

- [2] Higuera F.J., Jimenez J. Boltzmann approach to lattice gas simulations // *Europhys. Lett.*, 1989. V. 9, № 7. P. 663–668.
- [3] Куперштох А.Л. Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость-пар методом решеточных уравнений Больцмана // *Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”*, 2005. Т. 5, № 3. С. 29–42.
- [4] Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., Karpov D.I. On equations of state in a lattice Boltzmann method // *Computers and Mathematics with Applications*, 2009. V. 58, № 5. P. 965–974.
- [5] Kupershtokh A.L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // *Computers and Mathematics with Applications*, 2010. V. 59, № 7. P. 2236–2245.
- [6] Li W., Wei X., Kaufman A. Implementing lattice Boltzmann computation on graphics hardware // *Visual Computer*, 2003. V. 19. P. 444–456.

МОДУЛЬНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ЯЗЫКА “ПИФАГОР”

Матковский И.В.

Сибирский федеральный университет

Функциональный язык потоково-параллельного программирования “Пифагор” представляет собой созданный для исследовательских целей функциональный язык программирования. В рамках данной работы описан один из новых аспектов языка – модульная система.

Модулем в ФЯПП “Пифагор” называется файл, содержащий набор выражений и функций. Функция – подпрограмма, могущая принимать аргументы и возвращать результаты их обработки. Выражение не принимает аргументов и лишь возвращает некое значение.

Написанный файл с программой передается транслятору; транслятор преобразует программу в двоичный промежуточный формат. Начинается двоичный файл с таблицы имен функций и выражений – она используется при импорте данного модуля другими; далее содержатся информационные графы функций и выражений модуля.

При импорте внешнего модуля первый контакт с ним происходит на этапе трансляции – синтаксический анализатор считывает таблицу имен импортируемого модуля и проверяет наличие в ней используемых в транслируемом модуле функций и выражений. Обращение к внешнему элементу осуществляется с указанием имени модуля – так, функция `fact` из модуля `math` должна вызываться как `math.fact`; таким образом, всегда можно однозначно понять, в каком модуле содержится искомый элемент.

Процесс интерпретации начинается с указания вызываемого модуля и функции. Вызванный модуль заносится в специальный массив; из него извлекаются управляющий и информационный граф функции. Если по ходу интерпретации потребуется вызов некоей внешней функции, сначала интерпретатор будет искать модуль среди уже загруженных.

Для выражений также имеется отдельный – ассоциативный – массив. Поскольку результат выражения не зависит от внешних воздействий, нет смысла вычислять его при каждом использовании – достаточно проделать это лишь раз, а затем использовать полученный результат. Если на момент запроса выражение еще не было вычислено, оно обрабатывается, как

обычная функция. После выполнения результат выражения заносится в массив с именем выражения в качестве ключа – теперь, если это же выражение будет запрошено вновь, не будет необходимости вызывать его вторично.

PARALLEL EXPLICIT RUNGE-KUTTA METHOD 2nd ORDER: IMPLEMENTATION OF ACCURACY AND STABILITY CONTROL ¹

Novikov E.A.¹, Vashchenko G.V.^{1,2}

¹*Institute of Computational Modelling SB RAS*

²*Siberian State Technological University*

Differential equations arise in many fields of application, such as in the simulation of phenomena in physics, mechanics, chemistry, biology and so forth. These equations are often in the form of a stiff initial value problems [1], [2]. We describe a parallel explicit Runge–Kutta integration scheme second order in which an accuracy and stability control algorithm are included.

Consider a stiff initial value problem

$$y' = f(y), y(t_0) = y_0, t_0 \leq t \leq t_k, \quad (1)$$

where $y: [t_0, t_k] \rightarrow R^N$, $f: [t_0, t_k] \times R^N \rightarrow R^N$, $[t_0, t_k]$ – interval integration. Without loss of generality, assume that (1) is an autonomous system. Note that a non-autonomous system $y' = f(y, t)$ is always possible to write in an autonomous form as (1). Assume that there exists a unique solution to the problem (1) and that p is an amount of processors on computational system,

¹This work was supported by the RFBR under Grant No. 08-01-00621 and President under Grant SSCH-3431.2008.9.

N is a dimension of the system (1) and $N > p$, we write a parallel explicit Runge–Kutta scheme as in [3]

$$y_{j_s}^{(n+1)} = y_{j_s}^{(n)} + 0.5 \left(K_{1,j_s}^{(n)} + K_{2,j_s}^{(n)} \right),$$

$$y_{j_s}^{(0)} = y_{j_s}(t_0), \quad 1 \leq j \leq p; \quad (j-1) \cdot s \leq j_s \leq j \cdot s,$$

where $s = N/p$, if N multiple p , or $[N/p] + g$, otherwise, $y_{j_s}^{(n)} \in \text{proc}(j)$, $K_{1,j_s}^{(n)} = h_n f_{j_s}(y^{(n)}) \in \text{proc}(j)$, $K_{2,j_s}^{(n)} = h_n f_{j_s}(y^{(n)} + K_{1,j_s}^{(n)}) \in \text{proc}(j)$. We design a parallel algorithm by using a graph reduction technique and decomposition technique on a subtasks [4]. Our method based on the use of automatic control of accuracy and of stability dynamically as the solution develops. A value of a step size h_n which will give the required solution with an estimated local error exactly equal to the requested tolerance and stability condition. It is shown [1] that when a variable stepsize of integration is used, the efficiency of the explicit Runge–Kutta method can be increased by means of a step choosing algorithms in which an accuracy and stability are controlled. In our method, a stability control is based on using of a estimation of a largest eigenvalue of Jacobian matrix by a power method across of right side system (1) differential and the following control as $h|\lambda_{max}| \leq D$, where D is a stability region size. This approach leads not to increase in a calculation cost.

Parallel numerical algorithm is as follows. The $y_{j_s}^{(n)}, f_{j_s}(y^{(n)})$ are distributed onto a p of processes according to the block scheme to ensure “good” load balance as well as the scalability of the algorithm. An each task U_j is performed on one processor $\text{proc}(j)$, $U_j \in \text{proc}(j)$. $\text{Proc}(1)$ defines a value h_n and broadcasts to the other $\text{proc}(j)$, as operation *one-to-all*. An each $\text{proc}(j)$ computes $y_{j_s}^{(n)}$ its part and broadcasts to the other $\text{proc}(j)$, as *all-to-all*. In additional, $\text{proc}(j)$ calculates a local norm, $\|K_{2,j_s}^{(n)}\|$

$-K_{1,j_s}^{(n)}||$ and sends to the *proc*(1). The program code is written in C/C++ with MPI-functions. The computations were done on a cluster MVS ICM having 99 processors [5].

Литература

- [1] Novikov E.A. Explicit methods for stiff systems. Novosibirsk: Nauka, 1997.
- [2] Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Springer-Verlag, 1996.
- [3] Vashchenko G.V., Novikov E.A. Parallel implementation of explicit Runge–Kutta methods // Vestnik KrasGAU, 2010. № 2. P. 14–18.
- [4] Quinn M.J. Parallel Programming in C with MPI and OpenMP. New York, NY: McGraw-Hill, 2004.
- [5] Isaev S.V., Malyshev A.V., Shaidurov V.V. Development of Krasnoyarsk’s parallel computing centre // Computing Technologies, 2006. № 11. P. 28–33.

АЛГОРИТМЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ЗАДАЧ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ КЛАСТЕРЕ С УЧЕТОМ СЕТИ И МНОГОПРОЦЕССОРНОСТИ УЗЛОВ

Полежаев П.Н.

Оренбургский государственный университет

Большинство современных управляющих систем вычислительного кластера при планировании задач не учитывают топологию вычислительной системы и коммуникационные задержки, возникающие при выполнении параллельных программ. Это не имеет значения, когда топология системы реализована в виде полного графа, в котором одновременно могут передавать данные любые $n/2$ пар узлов (например, когда они подключены к общему коммутатору), но современные кластерные системы часто имеют и другие топологии, например, гиперкуба, двумерного тора или толстого дерева.

Современные планировщики также не всегда принимают во внимание иерархичность структуры современного вычислительного кластера, когда каждый узел представляет собой многопроцессорную систему, а каждый ее процессор, в свою очередь, содержит несколько вычислительных ядер. Если задача активно использует сеть для обмена информацией между выполняющимися процессами, то, при оптимальном назначении исполнительных ядер, может быть существенно сокращено время ее выполнения, а, следовательно, увеличится средняя загрузка вычислительных узлов.

Также современные управляющие системы не всегда рассматривают случай, когда вычислительные узлы имеют неоднородный состав, т.е. когда они отличаются объемами доступной оперативной и дисковой памяти, количеством про-

цессоров, ядер, их производительностью.

В ходе проводимого исследования были предложены две модификации алгоритма планирования Backfill: Backfill Maximum Distance Minimization и Backfill Summed Distance Minimization. Они учитывают все перечисленные выше факторы.

Экспериментальное исследование предложенных алгоритмов с помощью симулятора вычислительного кластера и его управляющей системы подтвердило эффективность данных алгоритмов перед другими вариантами для топологий системы в виде толстого дерева, тора и звезды в случаях однородной и гетерогенной конфигурации вычислительных узлов.

РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ НЕКОТОРЫХ ЯВНЫХ И НЕЯВНЫХ МЕТОДОВ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА

Рогалев А.Н.¹, Рогалев А.А.²

¹*Институт вычислительного моделирования СО РАН*

²*Сибирский федеральный университет*

В докладе рассматривается решение на многопроцессорных вычислительных системах краевых задач для параболических уравнений в областях прямоугольной формы. Существует потребность адаптировать известные численные методы решения этих задач к вычислениям на многопроцессорных вычислительных системах (МВС). При разработке параллельных программ для МВС требуется, чтобы структура алгоритма и программы соответствовала особенностям ар-

хитектуры вычислительной системы, или чтобы выполнение операций алгоритма возможно было векторизовать. В этом случае может быть достигнуто максимальное значение показателей производительности.

Параллельные архитектуры оказывают сильное влияние на поиск численных алгоритмов решения параболических уравнений. Наиболее общим подходом равномерного распределения вычислительной нагрузки между процессорными элементами при решении сеточных уравнений является распределение вычислительных областей на подобласти по принципу геометрической декомпозиции. Причем, как правило, построение этих разбиений на подобласти проводится для случая явных разностных схем. Однако часто такие схемы являются медленно сходящимися для стационарных краевых задач и требуют применения малого шага интегрирования – для нестационарных задач, ограничения на который накладывают условия устойчивости. В докладе проводится анализ вычислительных затрат и характеристик алгоритмов некоторых явных и неявных параллельных методов для решения уравнения теплопроводности. Приводятся результаты расчетов.

Литература

- [1] Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2002.
- [2] Миренков Н.Н. Параллельное программирование для многомодульных вычислительных систем. М.: Радио и связь, 1989.

- [3] Высокопроизводительные вычисления на кластерах. Учебное пособие/ Под ред. Старченко А.В. Томск: изд-во Томского гос. ун-та, 2008.
- [4] Головашкин Д.Л., Филатов М.В. Параллельные алгоритмы метода циклической прогонки // Компьютерная оптика, 2005. № 27. С. 123–130.
- [5] Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
- [6] Головашкин Д.Л. Параллельные алгоритмы решения сеточных уравнений трехдиагонального вида, основанного на методе встречных прогонок // Математическое моделирование, 2005. Т. 17, № 11. С. 118–128.
- [7] Рогалев А.Н, Рогалев А.А. Вычисление областей допустимых отклонений динамических систем с помощью параллельных алгоритмов // Труды Междунар. конф. “Параллельные вычисления и задачи управления”. М.: ИПУ им. Трапезникова РАН, 2008. С. 999–1009.

МОДЕЛЬ УПРАВЛЕНИЯ РЕСУРСАМИ ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ

Савченко Г.В.

Сибирский федеральный университет

Разработка прикладных параллельных программ, как правило, характеризуется использованием особенностей вычислительных ресурсов конкретной архитектуры. Параллельные системы программирования выделяют множество

процессов для выполнения прикладной задачи, а программист выстраивает их взаимодействие и передачу данных, учитывая специфику платформы. В некоторых параллельных языках программирования Sisal, Haskell [1, 2], T-система используется архитектурно-независимый принцип, когда программист лишь определяет прикладной алгоритм, а внешние утилиты – компиляторы, компоновщики, виртуальные машины и операционные системы – обеспечивают связь программы с вычислительными ресурсами. Использование таких систем программирования обладает многими положительными сторонами, среди которых возможность адаптации прикладной программы к другой архитектуре после завершения процесса отладки. Вместе с тем для таких систем отсутствует эффективная поддержка процесса вычислений, программы зачастую выполняются не совсем эффективно. Поэтому управление распределением ресурсов для подобных языков является актуальной задачей. В рамках ее решения предполагается:

- Изучение выделения и распределения ресурсов при выполнении программы независимо от используемого языка программирования.
- Определение состояний, в которых могут находиться ресурс и процесс.
- Управление связями ресурс–процесс при выполнении программы (управление ресурсами).
- Создание языка управления ресурсами для описания алгоритма управления ресурсами на основе модели состояний ресурсов и процессов.
- Верификация применимости языка управления ресурсами на примере конкретных стратегий организации вычислений параллельной программы.

Литература

- [1] Касьянов В.Н., Бирюкова Ю.В., Евстигнеев В.А. Функциональный язык SISAL 3.0 // Поддержка супервычислений и Интернет-ориентированные технологии. Новосибирск, 2001. С. 54–67.
- [2] Hudak P., Hughes J., Jones S.P., Wadler P. A history of Haskell: being lazy with class. In Proceedings of the Third ACM SIGPLAN Conference on History of Programming Languages (San Diego, California, June 09 – 10, 2007). HOPL III. ACM, New York, NY, 12-1-12-55.
- [3] Легалов А.И. и др. Модель функционально-поточковых параллельных вычислений и язык программирования “Пифагор” // Распределенные и кластерные вычисления. Избранные материалы второй Школы-семинара. Красноярск: ИВМ СО РАН, 2002. С. 101–120.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ КОНТАКТНЫХ ЗАДАЧ ¹

Садовская О.В.

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Предлагается алгоритм численной реализации граничных условий контактного взаимодействия упругопластических тел с учетом трения в зоне контакта. Контактные условия формулируются в терминах квазивариационных неравенств с односторонними ограничениями, моделирующими взаимное непроникание деформированных поверхностей. Дискретные неравенства решаются численно в граничных ячейках сеточной области с помощью метода последовательных приближений, на каждом шаге которого строятся проекции векторов скорости и некоторых вспомогательных векторов, служащих для учета трения, на специальные выпуклые и замкнутые множества [1].

Динамическое взаимодействие упругопластических тел с заранее неизвестной, изменяющейся со временем зоной контакта описывается на основе математической модели, учитывающей конечные повороты элементов тел при малых деформациях. В модель входят уравнения движения, закон Гука для упругих составляющих тензора деформации, уравнение для угла поворота и вариационное неравенство принципа максимума мощности диссипации энергии, записанное отно-

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 08-01-00148), Комплексной программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 2 и Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 40.

сительно пластических составляющих, [2]. Переход материала из упругого в пластическое состояние описывается условием Мизеса.

Для численной реализации модели на многопроцессорных вычислительных системах разработан параллельный алгоритм сквозного счета, основанный на комбинации методов расщепления по физическим процессам и по пространственным переменным. К решению полученных в результате расщепления одномерных систем уравнений применяется явная ЕНО–схема, адаптированная к разрывам решения. Распараллеливание вычислений осуществляется на шаге “предиктор” метода расщепления по пространственным переменным. Приводятся результаты расчетов косоуго соударения пластин в двумерной постановке.

Литература

- [1] Садовская О.В., Садовский В.М. Математическое моделирование в задачах механики сыпучих сред. М.: Физматлит, 2008. 368 с.
- [2] Аннин Б.Д., Садовская О.В., Садовский В.М. Численное моделирование косоуго соударения пластин в упругопластической постановке // Физическая мезомеханика, 2000. Т. 3, № 4. С. 23–28.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ СРЕД С МИКРОСТРУКТУРОЙ И ИХ ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ НА МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ ЭВМ ¹

Садовский В.М.

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Классические модели механики деформируемого твердого тела – теории упругости, пластичности и ползучести – не учитывают двух основных факторов, присущих в той или иной степени всем известным природным и искусственным материалам. Первый их них – различное сопротивление растяжению и сжатию, второй – структурная неоднородность. Симметричными по отношению к растягивающим и сжимающим деформациям можно с некоторой погрешностью считать металлы и их сплавы, но этим свойством отнюдь не обладают грунты, горные породы, углеграфиты, полимеры, пористые среды. Структуру (структурную неоднородность), связанную с атомным и кристаллическим строением вещества, имеют, очевидно, все материалы. Это наноразмерная – мелкомасштабная структура. Многие материалы обладают также структурой более крупного масштаба. В частности, горные породы имеют естественную кусковатость и, таким образом, неоднородны на макроуровне. В определяющих уравнениях структурно неоднородных сред наряду с поступательным движением необходимо учитывать вращательные движения частиц (блоков) относительно друг друга.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 08-01-00148), Комплексной программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 2 и Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 40.

В отличие от традиционных моделей механики деформируемых сред, в моделях структурно неоднородных материалов неявно присутствует малый параметр – характерный размер частиц микроструктуры. Поэтому при численном исследовании задач расчеты необходимо выполнять на сетках, размер ячеек которых значительно меньше этого параметра. При решении динамических задач в пространственной постановке оказываются эффективными параллельные алгоритмы, поскольку они позволяют распределять вычислительную нагрузку между большим числом узлов кластера. Использование распределенных вычислений дает возможность существенно измельчать расчетные сетки, повышая тем самым точность численного решения.

Для учета разнсопротивляемости материалов в докладе предлагается новый подход [1], позволяющий конструировать феноменологические определяющие соотношения таких материалов с помощью реологических схем. Обсуждаются проблемы разработки вычислительных технологий для проведения расчетов распространения волн в блочных массивах на суперкомпьютерах с параллельной архитектурой. Приводятся результаты расчетов, демонстрирующие наличие собственных резонансных частот в структурно неоднородных средах.

Литература

- [1] Садовская О.В., Садовский В.М. Математическое моделирование в задачах механики сыпучих сред. М.: Физматлит, 2008. 368 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ ОЧАГОВЫХ ОБЛАСТЕЙ СИЛЬНЫХ ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЙ

Симонов К.В.

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Исследование посвящено обоснованию и решению задачи оценки сейсмической опасности от ожидаемого сильного землетрясения на основе анализа данных геомониторинга процесса подготовки для изучаемой очаговой области.

Построенная алгоритмическая процедура анализа данных сейсмического мониторинга является, по своей сути, динамической и адаптивной, т.е. поступающие данные, формирующие так называемый “энергетический клин”, служат для последующего уточнения значений искомых параметров. Выделены и описаны стадии сейсмического процесса и построены соответствующие модели. Выполнена разработка алгоритмической процедуры параметризации энергетических характеристик изучаемого процесса для получения оценки времени и магнитуды ожидаемого основного события.

На этой методической и алгоритмической основе выполнены расчеты по оценке искомых параметров и характеристик для ряда сильнейших землетрясений, произошедших в 2006 – 2010 гг. Показано, что точность получаемых оценок существенно связана с качеством исходных данных, формирующих образ “энергетического клина”.

ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ТОМСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

Старченко А.В., Демкин В.П., Фарапонов В.В.
Томский государственный университет

Сегодня в мире суперкомпьютеры создаются для решения сверхсложных в вычислительном плане задач. В эту категорию попадают фундаментальные научные или прикладные инженерные задачи с широкой областью применения, для решения которых недостаточно ресурсов обычных персональных компьютеров (объема оперативной памяти или скорости обработки данных).

Суперкомпьютеры – мощный инструмент математического образования в целом и стимулирования интереса к параллельным вычислениям в частности. Расширение образования в области высокопроизводительных вычислений способствует проникновению параллельных вычислений в новые области науки и техники.

Важную роль в освоении научно-образовательным комплексом России высокопроизводительных вычислительных ресурсов должны играть и играют создаваемые при университетах суперкомпьютерные центры коллективного пользования.

16 февраля 2007 года в рамках Инновационной образовательной программы ТГУ был запущен суперкомпьютер “СКИФ Cyberia”, с производительностью 12 триллионов операций в секунду, для обеспечения его работы и предоставления доступа к высокопроизводительным вычислительным ресурсам создан Межрегиональный суперкомпьютерный центр ТГУ, приобретено специализированное программ-

ное обеспечение для проведения научно-технических разработок: ANSYS, LS-DYNA, FLUENT, FLOW VISION. В настоящее время этот суперкомпьютер также как и суперкомпьютеры МГУ, ННГУ, ЮУрГУ, ВГУ является сайтом программы “СКИФ-Полигон”.

В течение срока эксплуатации кластера “СКИФ Cyberia” пользователями высокопроизводительных вычислительных ресурсов было разработано большое количество оригинального прикладного программного обеспечения, использующего в параллельных вычислениях до тысячи одновременно выполняемых процессов. Также накоплен большой опыт применения на большом числе процессоров лицензированных пакетов для исследований в различных отраслях фундаментальных и прикладных наук.

Кроме того, в ТГУ разработаны краткосрочные программы повышения квалификации для специалистов естественнонаучного и физико-математического профиля (соискатели, докторанты, научные сотрудники учебных и научных учреждений, преподаватели). Объем каждой программы – 72 часа: “Многопроцессорные вычислительные системы”, “Высокопроизводительные вычисления на кластерах”. По этим программам к настоящему моменту переподготовлено более 100 человек из вузов и институтов Томска, Таганрога, Екатеринбург, Кемерово, Красноярска, Новосибирска, Северска, Ангарска, Волгограда, Калининграда.

В ТГУ проводится подготовка бакалавров, специалистов и магистров по высокопроизводительным вычислениям. Разработан учебно-методический комплекс “Параллельные компьютерные технологии”. Объем подготовки – 740 часов. Учебно-методический комплекс “Параллельные компьютерные технологии” включает обучение по следующим дисциплинам: “Теория разностных схем”, “Математиче-

ское моделирование на графах”, “Технологии параллельного программирования”, “Методы сплайн-функций”, “Матричные вычисления на суперкомпьютерах”, “Вычислительные методы в задачах экологии”, “Современные методы анализа и визуализации данных”, “Методы параллельных вычислений”, “Компьютерные сети и системы”, “Методы решения некорректных задач”, “Современные методы решения больших задач на многопроцессорных вычислительных системах”.

Для обучения студентов подготовлены:

- электронные образовательные ресурсы для дистанционного обучения параллельным компьютерным технологиям;
- электронный образовательный ресурс “Пакет прикладных программ Fluent для решения задач механики жидкости и газа и тепло-массопереноса”;
- электронные образовательные ресурсы для коллективного исследования физики атмосферы и загрязнения атмосферного воздуха с использованием вычислительного кластера;
- электронные образовательные ресурсы “Параллельные вычисления для школьников”;
- компьютерные тренажеры на базе кластера для принятия решений при чрезвычайной ситуации, связанной с аварийным выбросом в атмосферу.

Проведены пять Сибирских школ-семинаров и конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям (2001, 2003, 2005, 2007, 2009 гг.). Приняли участие более 400 студентов, преподавателей вузов и научных сотрудников академических институтов России, ближнего и дальнего зарубежья. Опубликованы материалы. Разработан сайт школы-семинара (<http://ssspc.math.tsu.ru>).

**ТЕОРИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ
И СУПЕРВЫЧИСЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ
АЭРОКОСМИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА
И ДИСТАНЦИОННОЙ НАНОДИАГНОСТИКИ
АТМОСФЕРЫ И ПОВЕРХНОСТИ ЗЕМЛИ ¹**

Сушкевич Т.А., Стрелков С.А., Максакова С.В., Козодеров В.В.,
Фомин Б.А., Волкович А.Н., Гаврилович А.Б., Дмитриев Е.В.,
Устюгов С.Д., Краснокутская Л.Д., Шари В.П., Фалалеева В.А.
*Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша РАН*

Посвящается 100-летию юбилею Главного Теоретика космонавтики академика М.В. Келдыша (10.02.1911–24.06.1978) и 35-летию программы “Союз–Аполлон” (ЭПАС, август 1975 года), а также 50-летию полета Ю.А. Гагарина 12 апреля 1961 года и 75-летию Г.С. Титова (11.09.1935–20.09.2000) – второго в мире космонавта, одного из организаторов и руководителей ракетно-космических войск.

Настоящая работа ориентирована на приложения в аэрокосмических системах наблюдений и дистанционного зондирования теории переноса излучения в диапазоне спектров солнечного и собственного излучения от жесткого ультрафиолета до миллиметровых волн. Особое внимание уделяется современным проблемам информационно-математического обеспечения нанодиагностики природных и техногенных сред, опасных явлений и объектов на основе аэрокосмического гиперспектрального дистанционного зондирования. Тра-

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 08-01-00024, 09-01-00071) и Программы фундаментальных исследований Отделения математических наук РАН № 3 (проект 3.5).

диционно разрабатываемые нами программные системы автоматизированного расчета реализуются на самых мощных и высокопроизводительных компьютерах с большими ресурсами внешней и оперативной памяти. Проблемами организации супервычислений коллектив занимается с 1989 года.

Нас интересует задача мониторинга и дистанционной нанодиагностики загрязнений атмосферы и поверхности Земли, источником которых являются извержения вулканов, пожары, военные действия и другие природные и техногенные катастрофы. Мы располагаем фундаментальной методической базой [1] для решения подобных задач, поскольку этими проблемами начали заниматься еще в 60-ые годы XX-го века и занимаем лидирующие позиции. Т.А. Сушкевич обеспечивала моделирование при проведении первых в мире научных экспериментов с космических пилотируемых кораблей, в которых из космоса были обнаружены стратосферные аэрозольные слои, возникшие в результате извержения вулкана, а также мощных пожаров и военных действий. Актуальные проблемы и сейчас.

Литература

- [1] Сушкевич Т.А. Математические модели переноса излучения. М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2005. 661 с.

**ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ
ЯВНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ
НА ГРАФИЧЕСКОМ ПРОЦЕССОРНОМ
УСТРОЙСТВЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ТЕХНОЛОГИИ CUDA ¹**

Трунов А.А.¹, Старченко А.В.^{1,2}, Турчановский И.Ю.³

¹ *Отдел проблем информатизации ТНЦ СО РАН*

² *Томский государственный университет*

³ *Институт сильноточной электроники СО РАН*

В ряде недавних работ было показано высокое ускорение (1-2 порядка) вычислений общего назначения (относительно центральных процессорных устройств традиционной архитектуры) при использовании графических процессорных устройств (ГПУ), см., например, [1, 2].

Одним из наиболее совершенных программно-аппаратных комплексов в настоящее время является платформа NVidia CUDA (Compute Unified Device Architecture). Стоит отметить, что существует альтернативная платформа, обладающая (в отличие от CUDA) свойством переносимости в классе ГПУ, – OpenCL [3], поддерживаемая многими производителями аппаратного обеспечения (AMD, NVidia и др.). Однако на данный момент OpenCL-программы требуют значительных усилий по оптимизации для каждого типа ГПУ. Поэтому в данной работе авторы ограничились рассмотрением технологии CUDA.

Целью настоящей работы является исследование возможностей CUDA для решения нестационарных задач математического моделирования с применением явных разностных схем. В данной работе поставленная проблема изучается на

¹Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 10-08-00984.

двух модельных задачах: решении двумерного уравнения теплопроводности с применением явной разностной схемы (пятиточечный шаблон типа “крест”), а также на задаче распространения электромагнитной волны в круглом волноводе (схема Yee).

Очевидные параллельные реализации заключаются в том, что каждый поток ГПУ вычисляет значения температуры или компонент электромагнитного поля в одной ячейке пространственной сетки. Однако, данный подход не является эффективным для рассматриваемых задач, характеризующихся низким отношением количества арифметических операций к количеству операций чтения/записи оперативной памяти.

Разработано несколько способов организации параллельных вычислений на ГПУ с учетом его архитектуры и размерности задач. Вычислены теоретически возможные ускорения оптимизированных параллельных программ относительно неоптимизированных “очевидных” версий.

Тестовые расчеты подтвердили, что на указанных выше типах задач ускорение составляет 1-2 порядка по сравнению с одно- и многоядерными персональными ЭВМ.

Результаты данной работы получают применение при решении задачи о динамике пучков заряженных частиц методом “частицы-в-ячейках”.

Литература

- [1] Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г., Шувалов П.В. Решение уравнения Больцмана на графических процессорах // Вычислительные методы и программирование, 2010. Т. 11.

- [2] Stantchev G., Dorland W., Gumerov N. Fast parallel Particle-To-Grid interpolation for plasma PIC simulations on the GPU // Journal of Parallel and Distributed Computing, 2008. V. 68. P. 1339–1349.
- [3] www.khronos.org/opencv
- [4] NVIDIA CUDA Programming Guide 3.1 // www.nvidia.com
- [5] NVIDIA CUDA Best Practices Guide 3.0 // www.nvidia.com

О РАЗВИТИИ НАУЧНЫХ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ СЕТЕЙ НА ПРИМЕРЕ ННЦ СО РАН И СИБИРСКОГО РЕГИОНА

Юрченко А.В., Шокин Ю.И., Федорук М.П., Чубаров Д.Л.
Институт вычислительных технологий СО РАН

В настоящее время наблюдается тенденция по концентрации вычислительных и информационных ресурсов в крупных центрах обработки данных и вычислительных центрах. В сибирском регионе такие центры расположены в ИВМиМГ СО РАН (ССКЦ), НГУ (ИВЦ НГУ), ТГУ и СФУ, а также в ИВТ СО РАН, ИДСТУ СО РАН, ИВМ СО РАН и др. Вопросы, связанные с организацией взаимодействия этих центров, предоставления доступа к их ресурсам, обеспечения высокого уровня доступности при эффективной загрузженности и др., связанные с их функционированием, не являются разрешенными до конца. В докладе рассматриваются как существующие проблемы, так и уже решенные задачи по обеспече-

нию потребителей высокопроизводительных компьютерных ресурсов из СО РАН доступом к соответствующим системам. На примере взаимодействия СО РАН, в лице ИВТ СО РАН, и НГУ показываются возможности по организации взаимовыгодного сотрудничества в области создания и применения научных суперкомпьютерных сетей.

Содержание

<i>А.А. Барт, А.В. Старченко</i> (Томск)	
Система краткосрочного прогноза качества воздуха над урбанизированной территорией . . .	5
<i>А.Т. Бекмуратов, Б.М. Шумилов, Ш.М. Матанов, Э.А. Эшаров</i> (Ош)	
Алгоритмы с расщеплением решения задачи сжатия сплайн-кривых	7
<i>И.О. Богульский, Н.А. Богульская</i> (Красноярск)	
Решение задачи моделирования движения гранизированной среды на основе распараллеливания	8
<i>Д.В. Бойков, А.А. Гаврилов, А.А. Дектерев, А.В. Минаков, А.В. Сентябов</i> (Красноярск)	
Параллельные вычисления с использованием CFD кода SigmaFlow	9
<i>Э.К. Вартамян</i> (Иркутск)	
Планирование схем решения задач в интегрированной кластерной системе	11
<i>М.П. Варыгина</i> (Красноярск)	
Комплекс прикладных программ для моделирования процессов распространения упругих волн в моментных средах на многопроцессорных вычислительных системах	14
<i>Е.А. Данилкин, А.В. Старченко</i> (Томск)	
Параллельная реализация математической модели движения воздуха и переноса пассивной газообразной примеси в уличных каньонах . . .	16

<i>E.V. Dementyeva, E.D. Karepova</i> (Красноярск) Numerical solution of assimilation data problem for shallow water equations	18
<i>B.H. Ермаков</i> (Красноярск) Мировые тренды НРС	21
<i>Л.П. Каменщиков</i> (Красноярск) О распараллеливании расчетов в задачах ди- намики взаимодействующих частиц	24
<i>А.Н. Кантер</i> (Иркутск) Методы распределения ресурсов в многоагент- ной вычислительной среде	26
<i>Е.Д. Кареева, Е.В. Дементьева, А.В. Малышев</i> (Красноярск) Сравнение реализаций MPI: управление памя- тью, обмена данными в SMP-узловых класте- рах	28
<i>В.Б. Кашкин, С.А. Перетокин, Ан.Г. Марчук, К.В. Симонов</i> (Красноярск) Перспективы обработки изображений при ди- станционном зондировании Земли на парал- лельных вычислительных устройствах по алго- ритмам сингулярного спектрального анализа и вейвлет-преобразования	29
<i>С.В. Кириллова, С.А. Перетокин, К.В. Симонов</i> (Красноярск) Решение задач геомониторинга на кластерах	32

<i>А.Ж. Кудуев, Б.М. Шумилов, Э.А. Эшаров, Ш.М. Матанов</i> (Ош)	
Использование пакета PETSc для решения задачи сжатия сплайн-кривых	34
<i>А.Л. Куперштох</i> (Новосибирск)	
Использование многопроцессорных графических ускорителей для параллельных вычислений при моделировании методом решеточных уравнений Больцмана двухфазных систем . . .	36
<i>И.В. Матковский</i> (Красноярск)	
Модульная система для языка “Пифагор” . . .	38
<i>Е.А. Novikov, G.V. Vashchenko</i> (Красноярск)	
Parallel explicit Runge–Kutta method 2nd order: implementation of accuracy and stability control	40
<i>П.Н. Полежаев</i> (Оренбург)	
Алгоритмы планирования задач на вычислительном кластере с учетом сети и многопроцессорности узлов	43
<i>А.Н. Рогалев, А.А. Рогалев</i> (Красноярск)	
Распараллеливание некоторых явных и неявных методов численного решения уравнений параболического типа	44
<i>Г.В. Савченко</i> (Красноярск)	
Модель управления ресурсами при выполнении параллельных программ	46
<i>О.В. Садовская</i> (Красноярск)	
Параллельный вычислительный алгоритм для решения динамических контактных задач . . .	49

<i>В.М. Садовский</i> (Красноярск)	
Математические модели динамики сред с микроструктурой и их численная реализация на многопроцессорных ЭВМ	51
<i>К.В. Симонов</i> (Красноярск)	
Моделирование данных наблюдений очаговых областей сильных землетрясений	53
<i>А.В. Старченко, В.П. Демкин, В.В. Фарапонов</i> (Томск)	
Высокопроизводительные вычисления в Томском государственном университете	54
<i>Т.А. Сушкевич, С.А. Стрелков, С.В. Максакова, В.В. Козодеров, Б.А. Фомин, А.Н. Волкович, А.Б. Гаврилович, Е.В. Дмитриев, С.Д. Устюгов, Л.Д. Краснокутская, В.П. Шари, В.А. Фалалеева</i> (Москва)	
Теория переноса излучения и супервычисления в задачах аэрокосмического мониторинга и дистанционной диагностики атмосферы и поверхности Земли	57
<i>А.А. Трунов, А.В. Старченко, И.Ю. Турчановский</i> (Томск)	
Параллельная реализация явных разностных схем на графическом процессорном устройстве с использованием технологии CUDA	59
<i>А.В. Юрченко, Ю.И. Шокин, М.П. Федорук, Д.Л. Чубаров</i> (Новосибирск)	
О развитии научных суперкомпьютерных сетей на примере ННЦ СО РАН и Сибирского региона	61