

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

**ПЯТАЯ СИБИРСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ И
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМ
ВЫЧИСЛЕНИЯМ**

**ПРОГРАММА И ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
(1-3 декабря 2009 года)**

Издательство Томского университета
2009

УДК 519.6
ББК 22.18
П 99

П 99 **Пятая** Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям: Программа и тезисы докладов (1-3 декабря 2009 года). – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2009. – 90 с.

ISBN 978-5-7511-1931-7

Представлены программа и тезисы докладов участников Пятой Сибирской конференции по параллельным и высокопроизводительным вычислениям, которая пройдет в Томском государственном университете с 1 по 3 декабря 2009 года при поддержке Федерального агентства по образованию РФ и Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 09-01-0611Г и 09-01-01700Э_Г).

Для научных сотрудников, аспирантов, студентов, преподавателей, использующих высокопроизводительные вычислительные ресурсы в научной и учебной работе.

УДК 519.6
ББК 22.18

ПЯТАЯ СИБИРСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ И ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМ ВЫЧИСЛЕНИЯМ

С 1 по 3 декабря 2009 года в Томском государственном университете при поддержке Федерального агентства по образованию РФ и Российского фонда фундаментальных исследований пройдет Пятая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям. Информация о предшествующих сибирских школах-семинарах по параллельным вычислениям (2001, 2003, 2005 и 2007 гг.) находится на сайте: <http://ssspc.math.tsu.ru>

Целью конференции является обсуждение современных проблем вычислительной математики и параллельных вычислений на многопроцессорных системах, привлечение талантливой молодежи к решению сложных научно-технических задач с использованием суперкомпьютеров, обмен опытом подготовки специалистов по параллельным компьютерным технологиям.

Конференция пройдет в следующем формате: пленарное заседание и три секции:

- параллельные алгоритмы решения сложных задач;
- современные методы вычислительной математики;
- технологии параллельного программирования, анализ и оценка эффективности параллельных программ.

Программный комитет Пятой Сибирской конференции по параллельным и высокопроизводительным вычислениям

Тихонов А.Н., председатель Программного комитета, директор ГНИИ ИТТ "Информика", профессор, д.т.н., чл.-корр. РАО;

Майер Г.В., заместитель председателя Программного комитета, ректор ТГУ, профессор, д.ф.-м.н.;

Шокин Ю.И., директор ИВТ СО РАН, акад. РАН;

Воеводин В.В., заместитель директора НИВЦ МГУ, чл.-корр. РАН;

Лыкосов В.Н., гл.н.с. ИВМ РАН, чл.-корр. РАН;

Мальшкин В.Э., заведующий отделом ИВМиМГ СО РАН, профессор, д.т.н.;

Афанасьев К.Е., проректор КемГУ по информационным технологиям и открытому образованию, профессор, д.ф.-м.н.;

Вшивков В.А., в.н.с. ИВМиМГ СО РАН, профессор, д.ф.-м.н.;

Ильин В.П., в.н.с. ИВМиМГ СО РАН, профессор, д.ф.-м.н.;

Демкин В.П., проректор ТГУ по информатизации, профессор, д.ф.-м.н.;

Сущенко С.П., декан Финф ТГУ, профессор, д.т.н.;

Берцун В.Н., декан ММФ ТГУ, доцент, к.ф.-м.н.

Старченко А.В., заведующий кафедрой ММФ ТГУ, профессор, д.ф.-м.н.

Открытие конференции 1 декабря 2009 года в 10.00 в конференц-зале ТГУ (227-я аудитория главного корпуса ТГУ, пр. Ленина, 36).

Программа Пятой Сибирской конференции по параллельным и высокопроизводительным вычислениям

1 декабря 2009 года

(конференц-зал ТГУ – 227-я ауд. главного корпуса ТГУ)

10.00-10.30 Открытие Пятой Сибирской конференции

Вступительное слово ректора Томского государственного университета, председателя Оргкомитета профессора Г.В. Майера

Выступление декана ММФ ТГУ В.Н. Берцуна

Пленарные доклады

10.30-11.00 Малышкин В.Э. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Особенности исполнения фрагментированных программ»

11.00-11.30 Ильин В.П. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «О конвергенции алгоритмических структур и компьютерных архитектур»

11.30-12.00 перерыв

12.00-12.30 Вшивков В.А., Снытников А.В. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Опыт решения задач с использованием кластерных суперЭВМ»

12.30-13.00 Афанасьев К.Е., Стуколов С.В. (КемГУ, Кемерово) «Инструментальные средства научно-образовательного портала параллельных вычислений Кемеровского государственного университета»

13.00-13.30 Глазунов А.В. (ИВМ РАН, Москва) «Вихреразрешающее моделирование турбулентных течений с использованием динамических замыканий»

13.30-14.00 Воеводин Вл.В. (НИВЦ МГУ, Москва) «Суперкомпьютерные технологии решения больших задач»

14.00-15.00 перерыв

15.00-15.20 Сущенко С.П. (ТГУ, Томск) «О быстродействии подсистемы памяти узлов вычислительного кластера»

15.20-15.40 Городняя Л.В. (ИСИ СО РАН, Новосибирск) «О проблеме начального обучения параллельному программированию»

15.40-16.00 Ткачев Д., Коптев А. (Т-Платформы, Москва) «Clustrx - новая операционная система для суперкомпьютеров»

- 16.00-16.20** Старченко А.В., Панасенко Е.А. (ТГУ, Томск) «Параллельные алгоритмы для решения прямых и обратных задач переноса примеси»
- 16.20-16.40** Паасонен В.И. (ИВТ СО РАН, НГУ, Новосибирск) «Параллельный алгоритм на основе компактных схем для уравнения колебаний»
- 16.40-17.00** Шагинян А.А., Арсенян Л.Г., Погосян А.Г., Шагинян К.А. (ИППФ НАН РА, МНОЦ НАН РА, Ереван, Армения) «Исследование динамической структуры вещества при помощи высокопроизводительных вычислений»
- 17.00-17.20** Бубенчиков А.М., Федин Д.Б., Конончук А.С. (ТГУ, Томск) «Кинетические модели динамических систем для многопроцессорных ЭВМ»
- 17.20-17.40** Джораев А. (NVIDIA Russia, Москва) «Эволюция графических процессоров и высокопроизводительные вычисления на GPU»
- 17.40-18.00** Михайлов М.Д., Овчинникова К.Д. (ТГУ, Томск) «Учебной лаборатории кафедры вычислительной математики и компьютерного моделирования ММФ ТГУ - 20 лет»

2 декабря 2009 года

(конференц-зал ТГУ – 227-я ауд. главного корпуса ТГУ)

Секция «Параллельные алгоритмы решения сложных задач»

(Председатели секции – В.А. Вшивков, В.Э.Мальшкин)

- 9.00-9.15** Евтушенко Е.П., Смолин И.Ю., Макаров П.В. (ИФПМ СО РАН, ТГУ, Томск) «Особенности развития сверхбыстрых режимов с обострением в эволюционных задачах»
- 9.15-9.30** Стуколов С.В., Рейн Т.С., Макарчук Р.С. (КемГУ, Кемерово) «Библиотека параллельных программ для численного моделирования двумерных течений несжимаемой жидкости со свободными границами»
- 9.30-9.45** Карабцев С.Н., Рейн Т.С. (КемГУ, Кемерово) «Параллельная реализация бессеточного метода конечных элементов для решения задач динамики несжимаемой жидкости со свободными границами»
- 9.45-10.00** Фенстер А.М. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Исследование клеточно-автоматной модели процесса формирования устойчивых образов и её параллельной реализации»
- 10.00-10.15** Снытников А.В. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Параллельная программа для трехмерного моделирования аномальной теплопроводности в высокотемпературной плазме»
- 10.15-10.30** Данилкин Е.А., Старченко А.В. (ТГУ, Томск) «Распараллеливание итерационных методов решения разностной задачи Дирихле для

уравнения Пуассона и анализ эффективности полученных параллельных реализаций»

10.30-10.45 Дьяченко Е.Н. (ТГУ, Томск) «Моделирование очистки воды от механических примесей методом дискретных элементов»

10.45-11.00 Ефремов И.Е. (ИСИ СО РАН, Новосибирск) «Реализация решателя квантифицированных булевых формул на графическом процессоре»

11.00-11.30 перерыв

11.30-11.45 Шилов Б.В., Горемыкин К.В. (СибГМУ, Томск), Проханов С.А. (ТГУ, Томск) «Использование высокопроизводительных вычислений для оптимизации решения задач фармакопротеомики»

11.45-12.00 Катаев М.Ю., Бойченко И.В. (ТУСУР, Томск) «Программное обеспечение задач моделирования отраженного от поверхности Земли солнечного излучения»

12.00-12.15 Киреев С.Е. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Параллельная реализация на суперЭВМ модели гравитирующей газопылевой системы»

12.15-12.30 Ильин В.П., Кныш Д.В. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Параметрический метод декомпозиции решения многомерных краевых задач»

12.30-12.45 Невидимов А.В. (ТГУ, Томск) «Распараллеливание обработки звука с использованием графического процессора на основе технологии CUDA»

12.45-13.00 Бутюгин Д.С., Петухов А.В. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Экспериментальный сравнительный анализ МКЭ и МКО для моделирования трехмерных гармонических электромагнитных полей»

13.00-14.00 перерыв

14.00-14.15 Панченко Н.В., Перевозкин Д.В. (НГУ, ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Параллельные итерационные методы переменных направлений для решения трехмерного диффузионно-конвективного уравнения»

14.15-14.30 Петушкеев Б.Л. (ТГУ, Томск) «MPI-IO: Практические аспекты разработки масштабируемых приложений»

14.30-14.45 Соловьев С.А., Пудов С.Г. (Intel® Corporation, Новосибирск) «Out-of-core PARDISO* – параллельный прямой решатель Intel® MKL больших разреженных систем линейных уравнений»

14.45-15.00 Деги Д.В. (ТГУ, Томск) «Высокопроизводительные вычисления на SMP-машинах и графических процессорах»

15.00-15.15 Лазарева Г.Г. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Численное моделирование гравитирующих газовых систем на суперЭВМ»

15.15-15.30 Логинова А.В. (НГТУ, Новосибирск) «Параллельная реализация волнового процесса с помощью гексагональной клеточно-автоматной модели»

15.30-15.45 Товпинец А.О. (ТГУ, Томск), Жуков Е.В. (РГУ, Калининград) «Алгоритм решения задач моделирования динамически нагруженных порошковых сред с использованием многопроцессорных вычислительных систем»

15.45-16.00 Трунов А.А., Старченко А.В., Турчановский И.Ю., Шкляев В.А. (Томский научный центр, Томск) «Моделирование на вычислительном кластере динамики тонкого трубчатого замагниченного моноэнергетического пучка электронов»

16.00-16.30 перерыв

16.30-16.45 Шарифулина А.Е. (НГТУ, Новосибирск) «Параллельная реализация вероятностного асинхронного клеточного автомата, моделирующего каталитическую реакцию окисления монооксида углерода (CO) на поверхности палладия (Pd₁₁₀)»

16.45-17.00 Черный С.Г., Чирков Д.В., Банников Д.В. (НГУ), Скороспелов В.А., Турук П.А. (ИВТ СО РАН, НГУ, ИМ СО РАН, Новосибирск) «Численное моделирование нестационарных течений в гидротурбине на многопроцессорных системах»

17.00-17.15 Дементьева Е.В. (ИМ СФУ, Красноярск), Карпова Е.Д., Шайдуров В.В. (ИВМ СО РАН, Красноярск) «Анализ параллельных реализаций МКЭ для моделей мелкой воды»

17.15-17.30 Берцун В.Н., Бородин А.В. (ТГУ, Томск) «Параллельные алгоритмы на графах»

17.30-17.45 Катаев М.Ю., Бойченко И.В., Лукьянов А.К. (ТУСУР, Томск) «Алгоритм распараллеливания в задаче расчета отраженного солнечного излучения от поверхности Земли в ближней ИК области спектра»

17.45-18.00 Немирович-Данченко М.М. (ТГАСУ, Томск) «Использование совмещенных лагранжевых сеток для компьютерного моделирования разрушения твердых тел»

18.00-20.00 Практические занятия на кластере ТГУ СКИФ Cyberia «Параллельные методы решения задач вычислительной математики» (229-я ауд., 10-й учебный корпус ТГУ), преподаватели – В.И. Лаева, А.А. Трунов; инструкторы – сотрудники ТГУ Проханов С.А., Данилкин Е.А., Смирнов И.Е.

3 декабря 2009 года

(конференц-зал ТГУ – 227-я ауд. главного корпуса ТГУ)

Секция «Современные методы вычислительной математики»

(Председатели секции – В.П. Ильин, В.Н. Берцун)

9.00-9.15 Аркабаев Н.К., Шумилов Б.М., Эшаров Э.А., Кудуев А.Ж. (Ошский ГУ, Ош, Киргизия, ТГАСУ, Томск) «Вариационное

моделирование пространственных кривых с помощью кубических эрмитовых сплайн-вейвлетов»

9.15-9.30 Геренг Ю.В., Сидоренко Ю.Н. (ТГУ, Томск) «Выбор оптимальной структуры композита с использованием генетического алгоритма»

9.30-9.45 Турсунов Д.А., Шумилов Б.М., Эшаров Э.А., Турсунов Э.А. (Ошский ГУ, Ош, Киргизия, ТГУ, Томск) «Новый тип эрмитовых мультивейвлетов пятой степени»

9.45-10.00 Белов С.В., Жаровцев В.В. (НИИПММ, Томск) «Схема «предиктор – корректор» с заданными свойствами для одномерных изотермических уравнений газовой динамики»

10.00-10.15 Свешников В.М. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Гибридный метод декомпозиции области для решения краевых задач»

10.15-10.30 Фомин А.А., Фомина Л.Н. (КемГУ, Кемерово) «Обоснование корректности полинейного рекуррентного метода решения разностных эллиптических уравнений»

10.30-10.45 Цыденов Б.О. (ТГУ, Томск) «Численный метод расчета явления термического бара в озере Байкал»

10.45-11.00 Турсунов Д.А., Эшаров Э.А., Бекмуратов А.Т. (Ошский ГУ, Ош, Киргизия, ТГАСУ, Томск) «Приближенное решение дифференциальных уравнений четвертого порядка вейвлет-методом Галеркина»

11.00-11.30 перерыв

11.30-11.45 Шапошников А.И. (Томский институт академии ВЭГУ, Томск) «Кластеризация в анализе движения в изображении с неподвижной камерой»

11.45-12.00 Шерина Е.С. (ТГУ, Томск) «Исследование неоднородной структуры биологического объекта при пропускании электрического тока небольшой силы»

12.00-12.15 Федорова О.П. (ТГУ, Томск) «Примеры применения сплайнов, сохраняющих интеграл функции, при обработке цифрового изображения»

12.15-12.30 Гурина Е.И. (ТГУ, ТЭМЗ, Томск) «Численное исследование процессов, протекающих в проточной части вентилятора»

Секция «Технологии параллельного программирования, анализ и оценка эффективности параллельных программ»

(Председатели секции – К.Е. Афанасьев, А.В. Старченко)

12.30-12.45 Мамоиленко С.Н., Ефимов А.В. (Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, Новосибирск) «Генетический алгоритм распределения параллельных задач с нефиксированными параметрами по машинам распределенной вычислительной системы»

12.45-13.00 Курносоев М.Г. (Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск) «Алгоритмы коллективных информационных обменов для иерархических распределенных вычислительных систем»

13.00-14.00 перерыв

14.00-14.15 Окулов Н.Н.(КемГУ, Кемерово) «Система обеспечения виртуального рабочего пространства для проведения численных экспериментов на распределенных вычислительных комплексах»

14.15-14.30 Павский В.А. , Павский К.В. (КемТИ, Кемерово; Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск) «Расчет показателей эффективности функционирования распределенных вычислительных систем при решении задач потока с отказами»

14.30-14.45 Пазников А.А. (Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, Новосибирск) «Децентрализованная диспетчеризация параллельных программ в распределенных вычислительных системах»

14.45-15.00 Перегудов Е.Б., Перепелкин В.А. (НГТУ, ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Реализация распределённой runtime-системы исполнения фрагментированных программ»

15.00-15.15 Гранкин В.К., Перепелкин В.А., Тальников А.В. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Автоматическое обеспечение динамической балансировки загрузки в технологии фрагментированного программирования»

15.15-15.30 Власенко А.Ю. (КемГУ, Кемерово) «Подсистема автоматического обнаружения логических ошибок в MPI-программах информационно-вычислительного портала Кемеровского государственного университета»

15.30-15.45 Андреев Н.Е. (КемГУ, Кемерово) «Система автоматизированного поиска шаблонов неэффективного поведения UPC-программ»

15.45-16.00 Ларин В.В. (ИВМиМГ СО РАН, НГТУ, Новосибирск) «Задавание управления во фрагментированных программах сетями Петри и проверка корректности управления»

16.00-16.30 перерыв

16.30-16.45 Иордан В.И., Соловьев А.А. (Алтайский государственный университет, Барнаул) «Ускорение цифровой обработки сигналов за счет технологии параллельных вычислений CUDA на базе видеочипов NVIDIA»

16.45-17.00 Перепелкин В.А. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) «Представление алгоритмов в технологии фрагментированного программирования»

17.00-17.15 Щукин Г.А. (НГТУ, Новосибирск) «Runtime-система FP RTS управления исполнением фрагментированных программ на мультимедийном компьютере»

17.15-17.30 Бойченко И.В., Корытников С.В., Лежанкин А.В. (ТУСУР, Томск) «Сервис-ориентированная архитектура доступа к ресурсам высокопроизводительных вычислительных систем»

17.30 Закрытие конференции

Тезисы докладов Пятой Сибирской конференции по параллельным и высокопроизводительным вычислениям

О конвергенции алгоритмических структур и компьютерных архитектур

В.П.Ильин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Традиционно распараллеливание методов решения больших задач рассматривается как проблема отображения алгоритмов на архитектуру (заданную!) многопроцессорных вычислительных систем (МВС). Исторически, однако, компьютеры проектировались и разрабатывались с ориентацией на эффективную реализацию типовых численных задач и методов. Помимо универсальных ЭВМ, создавались различные специальные устройства: конвейеры, транспьютеры с риск-архитектурой, клеточные автоматы и нейросети, проблемно-ориентированные процессоры, – но они не выдержали экономической конкуренции простых кластерных систем общего назначения. Появление и все большее распространение графических процессоров (GPU) и Программируемых Логических Интегральных Схем (ПЛИС) делает реальным оперативное промышленное производство относительно дешевых “заказных” реконфигурируемых компьютеров под алгоритм или задачу. Данная проблема особенно актуализируется в связи с планами появления новых машин петафлопного и эксафлопного быстродействия с сотнями тысяч и миллионами ядер.

В данной работе обсуждаются методологические особенности сеточных и алгебраических методов, а также порождаемых ими структур данных, с целью формирования основных требований к функциональным особенностям МВС, которые могли бы поддерживать эффективную реализацию задач нового поколения и осуществлять встречное движение (конвергенцию) алгоритмических структур и компьютерных архитектур для достижения максимально возможной производительности.

Опыт решения задач с использованием кластерных суперЭВМ

В.А.Вишников, А.В.Снытников

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Исключительно быстрое, в историческом масштабе скачкообразное, развитие за последние два десятилетия однопроцессорных персональных компьютеров с существенным и постоянным улучшением их характеристик привело к их массовому использованию при проведении фундаментальных научных исследований и прикладных разработок, в которых были получены весьма важные, широко известные и применяемые во всех областях знаний результаты. Также стремительно развивались многопроцессорные системы. К настоящему времени во всех университетах и институтах имеются более или менее мощные кластерные многопроцессорные ЭВМ. Но, несмотря на характеристики суперкомпьютеров, фантастические по сравнению с характеристиками персональных ЭВМ, многопроцессорные системы не получили широкого применения в массовых научных исследованиях. Это вызывается целым рядом причин, на которых следует остановиться.

В настоящее время существует огромное количество эффективных алгоритмов для решения задач на однопроцессорных ЭВМ. И часто возникает необходимость решения одной и той же задачи, но с разным набором входных параметров. В этом случае многопроцессорная система эффективно используется для получения необходимого результата. Трудностей, связанных с распараллеливанием здесь не возникает. Потребность в распараллеливании какого-либо алгоритма возникает тогда, когда быстродействия одного процессора недостаточно для решения задачи в приемлемые сроки, либо когда нужна большая память для получения результата с необходимой точностью. Некоторые из алгоритмов легко поддаются распараллеливанию, поскольку они содержат большое количество независимых вычислений. Для решения других задач приходится создавать по существу новые алгоритмы.

Принято оценивать производительность суперЭВМ в единицах FloPS, т.е., максимальном (теоретическом или реально достигнутом) количестве операций в секунду. Однако такая оценка упускает из виду, во-первых, то, что в основном производительность падает за счет плохо организованного взаимодействия процессоров с оперативной памятью, и во-вторых, то, что необходимо сохранять на жестком диске как минимум, результаты расчета (особенно в случае трехмерных задач). Поэтому реаль-

ным показателем производительности суперЭВМ должно быть быстрдействие и объемы оперативной памяти и жесткого диска.

Существует также проблема отладки программ на суперЭВМ, в том случае, когда ошибка в межпроцессорных коммуникациях проявляется только лишь на большом числе процессоров. Как правило, для устранения ошибки необходимо несколько запусков в течение короткого времени, что невозможно на суперЭВМ без нарушения интересов других пользователей. В таком случае необходимо искусственно создать аналогичную ситуацию на небольшом числе процессоров (например, путем намеренного ввода ошибки в вычислительный алгоритм), и произвести отладку на небольшом числе процессоров.

Также полезным оказался опыт многоуровневых отладочных сообщений. При компиляции задается уровень отладки (начальный уровень – фиксировать вход в основные процедуры, высокий уровень – выводить все подробности, нулевой – вообще ничего не выводить), далее каждый процесс выводит отладочные сообщения в свой файл. В таком случае, когда в расчете на большом числе процессоров возникает неизвестная ошибка, можно повторить запуск, задав необходимый уровень отладки и локализовать ошибку.

Вследствие наличия на суперЭВМ системы очередей для запуска задач, результаты расчета, как правило, появляются значительно позже того, как задача была запущена. Поэтому необходимо перед постановкой задачи в очереди на большое время и большое число процессоров необходимо проверить эту задачу на максимально возможном числе меньших конфигураций (с меньших размеров сетки, на меньшем числе процессоров, и т.д.), и обязательно запустить именно эту конфигурацию на очень маленькое счетное время, чтобы убедиться, что задача правильно стартует. Для быстрейшего прохождения задач через систему очередей полезно учитывать колебания активности пользователей: спад активности утром, на праздниках, разницу во времени между городами, и т.д.

Опыт расчетов свидетельствует, что при повышении размерности задачи на порядок появляются принципиально новые трудности в реализации алгоритма, поэтому категорически нельзя сразу переходить от мелких, отладочных задач к крупномасштабным.

Кроме объективных, существуют субъективные трудности решения задач на суперкомпьютерах. Это связано с тем, специалист в области математического моделирования обычно не является специалистом в областях, связанных с компьютерной техникой, от «железа» и архитектуры ЭВМ до системного и аппаратного окружения, языков программирования, реализующих их трансляторов, отладчиков и т.п. Поэтому только проекты,

в которых усилия прикладных и системных специалистов объединяются, как правило, приводят к положительным результатам.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых № МК-3562.2009.9, грантов РФФИ № 08-01-00615, 08-01-00622, ИП СО РАН № 113.

Инструментальные средства научно-образовательного портала параллельных вычислений Кемеровского государственного университета

К.Е. Афанасьев, С.В. Стуколов

Кемеровский государственный университет, Кемерово

Технологии распределенных вычислений и систем вошли в перечень критических технологий Российской Федерации. Президент России Д.А.Медведев в августе 2009 года на заседании Совета безопасности заявил, что Россия намерена вкладывать средства в производство суперкомпьютеров, чтобы создавать конкурентоспособную продукцию, однако и поставил вопрос о том, насколько эффективным будет использование таких специфических и дорогостоящих ресурсов. Здесь прослеживается две проблемы: одна связана с подготовкой высококвалифицированных кадров и специалистов по направлению высокопроизводительных параллельных вычислений, вторая – по переносу существующего, накопленного за многие предшествующие годы, программного обеспечения для решения ресурсоемких задач с последовательной на параллельную (многопроцессорную) архитектуру СуперЭВМ. Важность подготовки кадров по указанному направлению подчеркивает и член-корр. РАН Вл.В. Воеводин “Через несколько лет отсутствие навыков работы с параллельными компьютерами будет равносильно компьютерной безграмотности”.

На основе ранее приобретенного опыта (выполнение НИР в рамках аналитической ведомственной целевой программы “Развитие научного потенциала высшей школы (2006-2008 годы) выполняется модернизация существующего информационно-вычислительного портала КемГУ и дополнение его специальным инструментарием, облегчающим процесс создания высокоэффективных параллельных программ и выполнения параллельных вычислений на имеющихся и доступных многопроцессорных вычислительных комплексах.

Основными результатами выполненной НИР стали: прототип типового информационно-вычислительного портала (<http://icp.kemsu.ru>) для организации и проведения высокопроизводительных вычислений, система

удаленного доступа и управления распределенными высокопроизводительными ресурсами, библиотека программ, реализующая различные численные методы для решения задач механики жидкости со свободными границами, оптимизированная для работы на многопроцессорных вычислительных системах.

В настоящее время ведется комплексное исследование, разработка и интеграция следующих подсистем в существующий информационно-вычислительный портал КемГУ:

- подсистемы Веб-доступа к высокопроизводительным вычислительным ресурсам с параллельной архитектурой;
- подсистемы управления распределенными вычислительными ресурсами;
- подсистемы мониторинга состояния вычислительных узлов;
- подсистемы автоматического контроля корректности параллельных программ;
- подсистемы оптимизации параллельных программ;
- подсистемы Веб-доступа к библиотекам параллельных программ, размещенных на информационно-вычислительном портале, для проведения численных экспериментов.

Все задачи имеют свою специфику и могут рассматриваться как отдельные модули, однако интеграция перечисленных подсистем в рамках информационно-вычислительного портала обеспечит полный набор инструментальных средств для использования высокопроизводительных вычислительных систем в учебном процессе и научных исследованиях.

Вихреразрешающее моделирование турбулентных течений с использованием динамических замыканий

А.В. Глазунов

Институт вычислительной математики РАН, Москва

Рассматривается численная вихреразрешающая модель (LES), предназначенная для расчета нестационарной трехмерной динамики несжимаемой жидкости или газа при очень больших числах Рейнольдса. В модели используется консервативная схема высокого порядка точности и смешанное локализованное замыкание динамического типа. Сравняются различные подходы к построению динамического замыкания. Обсуждаются характерные особенности расчетов турбулентных течений с применением предложенной методологии. Представлен ряд стандартных численных тестов по моделированию сдвиговых турбулентных течений и турбулентных течений при обтекании тел простой конфигурации. Результаты расче-

тов сравниваются с данными лабораторных измерений и результатами прямого численного моделирования. Обсуждается параллельная реализация модели, представлены результаты тестов, демонстрирующие эффективность параллельных вычислений на суперкомпьютере СКИФ МГУ.

О проблеме начального обучения параллельному программированию

Л.В. Городняя

Институт систем информатики им. А.П. Ершова СО РАН, Новосибирск

Возрастает актуальность обучения параллельному программированию, что требует развития языково-информационной поддержки введения в программирование. Доклад посвящен проблеме обучения параллельному программированию.

Определены уровни и цели начального (*полгода в 10-12 лет*) и допроизводственного (*2 года с/к для старшеклассников и студентов*) обучения в контексте истории языков программирования (*Basic, Pascal, Logo, Grow, Робик, Папира*). Проанализированы текущие задачи разработки учебных языков программирования, дополняющих основные парадигмы программирования на ЯВУ (императивное, функциональное, логическое, объектно-ориентированное) средствами параллельного программирования (*GPU, MPI, Open MP*).

Сформулированы требования к языкам начального обучения параллельному программированию.

- Многовариантность лингвистической базы.
- Визуализация объектов и процессов при отладке.
- Концентричность или разложение понятий по уровням обучения.
- Представление и преобразование моделей управления процессами.
- Определение видов памяти с разной дисциплиной доступа.
- Настраивание на реалии производственных языков и систем.
- Выводимость оценки значимых характеристик производительности программ, таких как объем вычислений, надежность, безопасность и др.

Отмечены проблемы реализации языка параллельного программирования допроизводственного уровня.

- Общая сетевая модель параллельных процессов.
- Средства и методы типизации моделей управления процессами, спецификации многоуровневой памяти и межпроцессорных взаимодействий.
- Анализ и преобразование программ в соответствии с целевой архитектурой и моделями управления процессами.

- Программная поддержка кросс-компиляции, отладки и оптимизации программ (тесты, протоколы и сценарии).
- Интеграция императивных и функциональных моделей вычислений с производственными системами.

Предложен проект языка начального обучения параллельному программированию на базе языка Робик с учетом современных языков учебного программирования и методик обучения программированию взаимодействующих и параллельных процессов. Работа поддержана грантом РФФИ 08-01-00899-а.

Литература

1. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. - СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.

2. Хоар Ч. Взаимодействующие последовательные процессы. М.: Мир, 264 с.

3. <http://en.wikipedia.org/wiki/> - Робик

Параллельные алгоритмы для решения прямых и обратных задач переноса примеси

А.В. Старченко, Е.А. Панасенко

Томский государственный университет, Томск

Проблема математического моделирования динамики атмосферы давно привлекает внимание ученых. Это вызвано тем, что исследование процессов, происходящих в атмосфере, тесно связано с решением задач теории климата и прогноза, имеющих большое практическое значение. В последние годы интерес к ней возрос в связи с проблемой взаимодействия человечества с окружающей средой. Учитывая сложность постановки натурных экспериментов в реальных условиях, наиболее естественный подход к изучению и оценке влияния деятельности людей на атмосферу состоит в создании математических моделей, позволяющих с помощью ЭВМ оценить возмущения основных параметров, характеризующих состояние среды.

Модели атмосферного пограничного слоя и переноса примеси в силу сложности рассматриваемых процессов и значительных размеров области исследования требуют максимально возможных вычислительных ресурсов. При этом, даже при наблюдаемом нами стремительном развитии вычислительной техники (и суперкомпьютеров, в частности) ученые всё ещё значительно ограничены в своих исследованиях вследствие нехватки вычислительных ресурсов. Современные тенденции в развитии моделей атмосферного пограничного слоя направлены на повышение простран-

венного разрешения, включения в рассмотрение параметризации более широкого спектра атмосферных явлений. В новейших моделях переноса примеси принято учитывать химические и фотохимические реакции между загрязнителями.

Эффективным способом сокращения времени расчета является применение вычислительных систем с параллельной архитектурой. При моделировании атмосферных процессов можно выделить два основных способа параллельной реализации алгоритмов: функциональная декомпозиция задачи и геометрическая декомпозиция расчетной области. В первом случае параллельно численно решаются нестационарные уравнения, возможно, неоднородные на различных вычислительных узлах. При таком подходе распараллеливания неизбежно возникает проблема балансировки, то есть обеспечения равномерного распределения вычислительной нагрузки между параллельными процессами. Более универсальным является подход, опирающийся на декомпозицию расчетной области. При этом область исследования разделяется на подобласти, число которых равно числу процессов, ведущих расчеты независимо друг от друга.

В данной работе представлены параллельные алгоритмы численного решения прямых и обратных задач исследования качества атмосферного воздуха. Прямые задачи рассматривают изменение с течением времени концентраций компонентов и могут состоять из системы нестационарных адвективно-диффузионно-кинетических уравнений большой размерности, которые связаны между собой источниковыми членами, описывающими протекание химических и фотохимических реакций. Обратные задачи, предназначенные для определения параметров источников выбросов примеси в атмосферу по данным измерений, при применении подхода, опирающегося на использование сопряженных уравнений и двойственное представление функционала от концентрации примеси, в окончательном виде также записываются в виде системы неоднородных нестационарных уравнений с источниковыми членами. Количество таких уравнений совпадает с количеством дискретных измерений концентрации примеси, количество которых может быть также велико.

В данной работе для решения таких систем уравнений на конечно-разностных сетках с количеством узлов несколько миллионов применяется метод конечного объема и явные разностные схемы высокого порядка аппроксимации (до третьего по времени и до шестого порядка по координатным направлениям). Параллельная реализация выполняется по одному из трех рассмотренных способов: 1) функциональная декомпозиция – когда отдельное уравнение системы решается во всей вычислительной области на отдельном вычислительном узле; 2) геометрическая декомпозиция – когда все уравнения системы одно за другим решаются для подобласти

(части области исследования) на отдельном вычислительном узле; 3) их комбинация – когда отдельное уравнение системы решается для подобласти на отдельном вычислительном узле.

Сравнительный анализ рассмотренных параллельных реализаций был проведен как с помощью теоретических оценок их масштабируемости, так и с помощью вычислительных экспериментов на кластере ТГУ СКИФ Cyberia. Получено, что при решении систем уравнений переноса небольшой размерности второй и третий способы имеют преимущество за счет уменьшения затрат на межпроцессорную пересылку данных. При решении систем, в которых количество уравнений измеряется несколькими десятками, более предпочтительным будет подход функциональной декомпозиции задачи.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 07-05-01126 и программы «СКИФ-ГРИД».

Использование совмещенных лагранжевых сеток для компьютерного моделирования разрушения твердых тел

М.М. Немирович-Данченко

Томский государственный архитектурно-строительный университет,
Томск

Предлагается методология, позволяющая в рамках одного вычислительного алгоритма объединить необратимый процесс деформирования и разрушения геосреды и обратимый процесс распространения упругих волн. При расчете деформирования среды используются обычные уравнения эластодинамики:

Это первый закон Коши (уравнения движения в напряжениях):

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho(X, Y, Z) \ddot{u}_i \quad (1)$$

и определяющие соотношения гипопругой среды

$$\sigma^{\nabla}_{ij} = c_{ijkl}(X, Y, Z) \dot{\varepsilon}_{kl}. \quad (2)$$

Здесь $\sigma^{\nabla}_{ij} = \frac{d\sigma_{ij}}{dt} - \Omega_{ik}\sigma_{kj} - \Omega_{jk}\sigma_{ki}$ - производная Яуманна, σ_{ij} -

тензор напряжений, $\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \dot{u}_j}{\partial x_i} \right)$ - тензор скоростей деформаций,

Ω_{ij} - спин-тензор, ρ - плотность, u_i - вектор смещения, C_{ijkl} - тензор модулей упругости, t - время, x_i - декартовы координаты X, Y, Z .

Поскольку определяющие соотношения записаны в инкрементальном виде, численная реализация системы (1) - (2) допускает конечное деформирование. Для анализа возможного разрушения среды используется интегральный критерий суммирования повреждаемостей. При его выполнении включается алгоритм, названный автором в свое время «методом раздвоения точек сетки». Суть алгоритма в использовании при разбиении расчетной области не одной лагранжевой сетки, а нескольких. Чтобы описать появление и распространение одной трещины, достаточно двух сеток (отсюда название «метод раздвоения»). Для расчета множественного разрушения горной породы в двумерной постановке вводится 4 сетки, в трехмерном случае – 8.

Итак, в общем случае каждый расчетный узел состоит из 8 лагранжевых точек. С начального момента времени и до разрушения точки формально совпадают. При выполнении критерия каждая из точек отходит к своему берегу вновь образованной несплошности. Это позволяет описать явно берега трещин, как свободные поверхности. Работа алгоритма раздвоения точек сетки показана на рис. 1. Деформации здесь специально утрированы для наглядности.

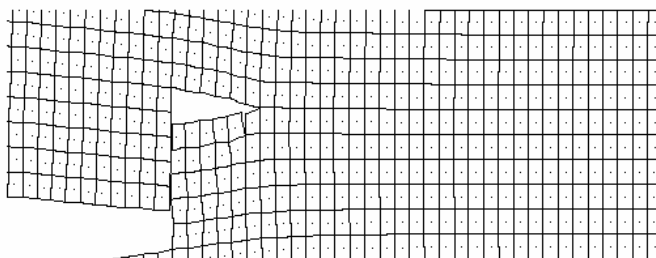


Рис.1. Пример расчета разрушения среды

При образовании свободных поверхностей излучаются упругие волны, распространение которых описывается системой (1)-(2). Таким образом, введена модель гипопругой хрупкой среды, описывающая как упругое деформирование и распространение сейсмических волн, так и необратимый процесс разрушения с образованием трещин со свободными от напряжений берегами.

Параллельный алгоритм на основе компактных схем для уравнения колебаний

В.И. Паасонен

Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирский государственный университет, Новосибирск

Доклад посвящен развитию предложенного автором [1] простого подхода к решению с повышенной точностью краевых задач, в том числе в неоднородных областях, составленных из однородных подобластей. В однородных подобластях используются факторизованные компактные разностные схемы, имеющие третий или четвертый порядок точности, а условия равенства потоков на границах раздела сред записываются с тем же порядком с использованием односторонних одномерных аппроксимаций производных по нескольким точкам. На внешних границах области также используются многоточечные аппроксимации потоков. Расщепление приводит к почти 3-точечным одномерным разностным задачам с отдельными изолированными аномалиями, соответствующими внутренним и внешним граничным условиям.

Распараллеливание задачи с такой матрицей совершенно аналогично известному методу Коновалова распараллеливания прогонки, только в данном случае в качестве точек разреза прогонки берутся границы раздела сред. Получающийся при этом параллельный алгоритм математически эквивалентен исходной задаче, которую можно решать также традиционным методом без распараллеливания.

Область применения метода, первоначально разработанного только для уравнения теплопроводности, оказалась значительно шире. Метод был распространен автором на стационарные задачи, задачи декомпозиции областей с постановкой на выделенных сечениях мягких внутренних граничных условий [2] и на задачи интерполяции данных гиперболическими сплайнами [3].

В данной работе метод распространяется на кра задачи для уравнения колебаний в кусочно-однородных областях. Во внутренних узлах каждой однородной подобласти используется трехслойная разностная схема

четвертого порядка точности по времени и пространству, а на границах раздела сред с различными модулями Юнга условия непрерывности натяжения аппроксимированы с тем же порядком с помощью односторонних многоточечных аналогов производных. Разработаны формулы пересчета решения в узлах, соответствующих уступам и точкам контакта трех или четырех сред, используемые для замыкания алгоритма при переходе на следующий временной слой.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 08-01-00264) и Интеграционного проекта СО РАН № 103.

Литература

1. Паасонен В.И. Параллельный алгоритм для компактных схем в неоднородных областях // Вычислительные технологии. 2003. Т. 8, № 3. С. 98–106.
2. Паасонен В.И. Параллельные алгоритмы на основе мягких внутренних граничных условий // Вычислительные технологии. 2006. Т. 11. Спецвыпуск, посвященный 85-летию со дня рождения Н.Н. Яненко. Ч. 2. С. 98–106.
3. Паасонен В.И. Высокоточные методы построения гиперболических сплайнов // Вычислительные технологии. 2007. Т.12, №2, С. 115 – 121.

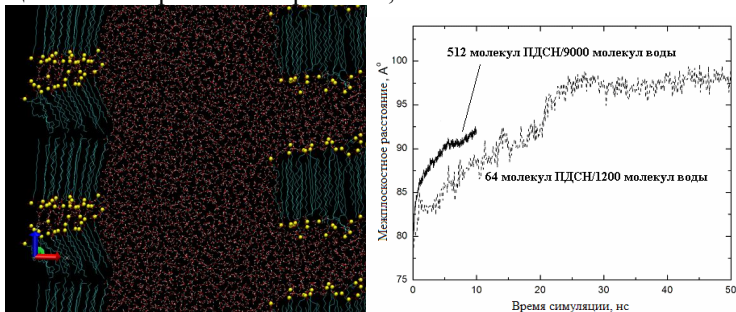
Исследование динамической структуры вещества при помощи высокопроизводительных вычислений

А.А. Шагинян, Л.Г. Арсенян, А.Г. Погосян, К.А. Шагинян

Институт прикладных проблем физики НАН РА, Международный научно-образовательный центр НАН РА, Ереван, Армения

Исследования последних лет показали, что методы и возможности параллельных высокопроизводительных вычислений можно эффективно использовать для изучения структуры и свойств многокомпонентных молекулярных систем в динамике. В этом плане применение этих методов, именуемых также *«компьютерным экспериментом»* может стать перспективным для исследования *динамических свойств и структуры кристаллов, в том числе и жидких кристаллов*. Для этого созданы и развиваются специализированные алгоритмы и инструменты расчета, одним из наиболее распространенным из которых является метод *«молекулярной динамики» (МД)*. Совместное применение методов физического и компьютерного экспериментов могут стать взаимодополняющими и стать источником получения совершенно новых знаний о строении и свойств исследуемых систем.

В настоящей работе метод компьютерного эксперимента был использован для исследования динамической структуры лиотропного жидкого кристалла (ЛЖК). При изучении структуры и свойств ЛЖК (концентрированный водный раствор пентадецилсульфоната натрия - ПДСН) решены нижеследующие задачи, что обеспечило получение принципиально новой информации о системе: построение термодинамически равновесной модели ЛЖК, исследование динамических характеристик и расшифровка рентгенограмм дифракции рентгеновских лучей под малыми углами системы при помощи компьютерного эксперимента;



Равновесная модель системы ПДСН/вода (а) и зависимость межплоскостного расстояния (б) системы от времени симуляции.

На рисунке представлена визуальная картина, полученная после достижения равновесного состояния, и динамика изменения межплоскостных расстояний в ЛЖК.

Эволюция графических процессоров и высокопроизводительные вычисления на GPU

А. Джораев

NVIDIA Russia, Москва

Архитектура GPU является массивно-параллельной, т.к. изначально он был создан для работы с графикой. С момента появления первого GPU и до сегодняшних дней он эволюционировал и стал значительно универсальнее. Колоссально возросла и вычислительная мощность GPU. Разработана специальная программно-аппаратная архитектура для программирования GPU с использованием языков C/ Fortran/C++. Использование гибридных вычислительных систем на основе GPU позволяет решать различные научно-технические задачи быстрее, точнее, и эффективнее, открывая новые возможности для научно-технического прогресса. Новое поколение

GPU NVIDIA еще больше ориентировано на вычислительные возможности и будет использовано для построения мощнейших в мире суперкомпьютеров.

Учебной лаборатории кафедры вычислительной математики и компьютерного моделирования ММФ ТГУ - 20 лет

М.Д. Михайлов, К.Д. Овчинникова

Томский государственный университет, Томск

22 декабря 2009 года исполняется двадцать лет учебной лаборатории кафедры вычислительной математики и компьютерного моделирования. За эти годы существенно изменилась вычислительная техника и технология преподавания на механико-математическом факультете. Вместо первоначальных компьютеров «ДВК-3» и «Искра» в количестве 10 и 8 ПЭВМ соответственно, пополнивших два дисплейных класса, появились IBM совместимые компьютеры, затем Pentium, Duron и другие. Преподавание базовых дисциплин «Методы вычислений» и «Информатика» стало ориентироваться на персональные вычислительные машины.

Студентам, которые учатся на ММФ сегодня, трудно представить, что почти 50 лет назад их сверстники, выполняя задания по «Методам вычислений», использовали арифмометр «Феликс» и Рейнметалл. Эти вычислительные средства составляли парк кабинета вычислительной техники, созданного при кафедре прикладной и вычислительной математики ММФ в то время. Во время работы на Рейнметаллах в аудитории стоял такой шум, что трудно было слышать, о чем говорит преподаватель. В те годы факультет, кафедры и кабинет располагались на третьем этаже южного крыла главного учебного корпуса ТГУ.

В настоящее время учебная лаборатория занимает три аудитории – дисплейные классы второго учебного корпуса. На факультете функционирует локальная сеть, связывающая дисплейные классы лаборатории, кафедры и деканат факультета и обслуживаемая сотрудниками ученой лаборатории. Дисплейные классы 314 и 316 оборудованы современной вычислительной техникой: достаточно мощные ПЭВМ «Селерон», по 13 компьютеров в каждом классе, интерактивные доски и мультимедийные средства, обеспечивающие проведение лекций, практических занятий, научных семинаров, защиту курсовых и дипломных работ на качественном уровне. Из дисплейных классов организован доступ преподавателей и студентов факультета к вычислительному кластеру ТГУ СКИФ «Cyberia», который используется для проведения занятий по параллельным вычислениям.

Особенности развития сверхбыстрых режимов с обострением в эволюционных задачах

Е.П. Евтушенко¹, И.Ю. Смолин^{1,2}, П.В. Макаров^{1,2}

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

На высокопроизводительном вычислительном кластере ТГУ СКИФ Cyberia реализована конечно-разностная схема параллельного счета для задач МДТТ. Алгоритм программы адаптирован для моделирования динамических задач в релаксационной постановке с эволюционными определяющими соотношениями.

На примере задачи моделирования обрушения кровли над выработанным пространством в угольной шахте рассматриваются сверхбыстрые режимы эволюции в модельной нелинейной геосреде. Применен синергетический подход к проблеме моделирования деформирования и разрушения геоматериалов. Самой общей особенностью эволюции различных систем оказалась их способность к изменению хода развития событий, с плавного на режим с обострением, в ходе которого система претерпевает кардинальные изменения, обретая новые структуры и свойства.

Нагружаемая полем сил тяжести геосреда с выработкой рассматривается как упруго-хрупкопластический материал с учётом внутреннего трения, сдвиговой дилатансии, накопления повреждений и деградации прочностных характеристик. В таком случае катастрофическому обрушению предшествует квазистационарная стадия накопления повреждений, в ходе которой происходит локализация неупругой деформации и формирование объёмных нелинейных источников и стоков, которые обеспечивают накопление и перераспределение деформационных дефектов и повреждений под внешними воздействиями.

В определяющих уравнениях реализованы положительные и отрицательные обратные связи. Отрицательные обратные связи обеспечивают релаксацию напряжений, стабилизируя процесс. Через положительную обратную связь нелинейный источник разгоняет автокаталитический процесс деградации – локализация повреждений приводит к уменьшению прочностных характеристик среды в областях локализации, что еще более усиливает в них процессы локализации деформации и повреждений. Ускоряя процессы локализации, положительные обратные связи способствуют образованию диссипативных нестационарных структур, а деградация прочностных характеристик среды в областях локализации, приводит к сверхбыстрым режимам эволюции системы – к режимам с обострениями,

т.е. в данном случае к развитию катастрофического сверхбыстрого обрушения определённых участков кровли.

Изучение режимов с обострением начинается с анализа состояния, предшествующего катастрофе. Если к некоторому шагу по времени процесса ΔT_i система оказалась подготовленной к сверхбыстрой эволюции, то последующий шаг ΔT_{i+1} позволяет подробно изучить этот сверхбыстрый режим, даже если его скорости будут близки к ударноволновым, так как внутренние шаги $\Delta t_n \ll \Delta T_i$ и позволяют подробно изучать любые динамические процессы.

Установлены времена наступления катастрофических режимов (для конкретных исходных данных: геометрия и глубина выработки, физико-механические параметры геосреды). Показано, что переход с меньших масштабов разрушения на большие, с образованием макроскопических магистральных разломов, также осуществляется как катастрофическое событие по описанному выше сценарию.

Библиотека параллельных программ для численного моделирования двумерных течений несжимаемой жидкости со свободными границами

С.В. Стуколов, Т.С. Рейн, П.С. Макаrchук
Кемеровский государственный университет, Кемерово

Задачи динамики жидкости со свободными границами представляют один из наиболее привлекательных для численного моделирования классов задач. Они требуют для своего решения применения новейших численных методик, поскольку хорошо разработанные классические методы позволяют получить надежные результаты лишь на начальных стадиях течения, но совсем не пригодны для моделирования развитых стадий, характеризующихся нарушением связности расчетной области и большими деформациями свободной границы. Для решения таких задач требуется значительно больший объем вычислительных ресурсов, чем может предоставить персональный компьютер. Это обусловлено как требованиями к быстродействию, так и необходимостью обработки и хранения большого объема информации. Использование технологий параллельного программирования для многопроцессорных вычислительных систем ускоряет проведение численных расчетов, а в ряде случаев является единственной возможностью получения высокоточных результатов за счет существенной детализации параметров расчетов.

В рамках работ по выполнению проекта [1] была создана библиотека параллельных программ [2], реализующая численные методы для реше-

ния задач динамики жидкости со свободными границами. Библиотека реализована на языке Fortran 90 с применением технологии передачи сообщений MPI и представляет собой набор объектных файлов и файлов входных данных для решения некоторых модельных задач. Однако использование библиотеки в учебном процессе и научных исследованиях не получило широкого применения в связи с относительной сложностью ее использования и необходимости в дополнительных знаниях, часто не имеющих отношения к исследуемым задачам.

По этим причинам возникла необходимость в интегрировании библиотеки в существующий информационно-вычислительный портал КемГУ (<http://icp.kemsu.ru>) в рамках подсистемы обеспечения виртуального рабочего пространства для проведения численных экспериментов, хранения, поиска и обработки информации, получаемой в результате расчетов. Выполнение данной работы послужит новаторским примером для сложившихся научных коллективов в Кемеровском государственном университете по переносу существующего авторского программного обеспечения, реализующего численные методы исследования разнообразных научных задач, на принципиально новую технологическую платформу.

Литература

1. НИР (РНП.3.2.3.4256): “Создание типового информационно-вычислительного портала для организации учебной и научной деятельности ВУЗа” аналитической ведомственной целевой программы “Развитие научного потенциала высшей школы (2006-2008 годы)”
2. «Библиотека параллельных вычислительных программ для задач гидродинамики со свободными границами» («HydroParaLib»). Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ №2008611207, от 07.03.2008г. Авторы: Афанасьев К.Е., Стуколов С.В., Березин Е.Н., Малышенко В.В., Григорьева И.В., Макарьчук Р.С., Карабцев С.Н., Рейн Т.С., Авзалов Д.Р.

Параллельная реализация бессеточного метода конечных элементов для решения задач динамики несжимаемой жидкости со свободными границами

С.Н. Карабцев, Т.С. Рейн

Кемеровский государственный университет, Кемерово

К одному из наиболее сложных для моделирования классов задач гидродинамики относятся задачи со свободными границами, сопровождающиеся сильно-нелинейной деформацией границ течений. Ряд такого рода задач был решен различными сеточными методами, основным недос-

татком которых является потребность в перестройке сетки в задачах с подвижными границами [1]. Чтобы преодолеть трудности, связанные с перестройкой сетки, в последнее время наблюдается стремительное развитие в разработке новых подходов на основе методов Галеркина и методов коллокаций. Они известны как методы частиц или бессеточные методы (БМ). Общее в этих методах то, что они не имеют никакой явной информации о связи между узлами. Но, таким образом, в стандартных бессеточных методах для того, чтобы найти интерполяционные функции, требуется обеспечить узловую связность. Так стали разрабатываться методы, сочетающие в себе сеточный и бессеточный подходы и использующие преимущества каждой из методологий. Характерными представителями этой группы методов являются бессеточный метод конечных элементов и метод естественных соседей (Natural Element Method) [2]. Данные методы используют функции формы Сибсона и Лапласа, основанные на понятии естественных соседей и базирующиеся на диаграммах Вороного первого и второго порядков. Единственность разбиения Вороного обеспечивает в методе естественных соседей единственность результата интерполяции неизвестных функций, но при этом сохраняется зависимость точности интерполяции от расположения узлов.

В связи с большими временными затратами бессеточный метод конечных элементов был адаптирован для проведения расчетов на высокопроизводительных параллельных вычислительных системах. В качестве библиотеки параллельного программирования была выбрана библиотека MPI. Также был проведен анализ реализации параллельных алгоритмов для решения 2D нестационарных задач механики жидкости со свободной поверхностью, который позволяет сделать вывод о том, что на кластере из обычных ПК можно получить значительное ускорение на реальных задачах с эффективностью более 90%. Алгоритмы, реализующие 2D MFEM, легко распараллеливаются и имеют среднюю степень параллелизма, близкую к идеальной.

Литература

1. Терентьев А.Г., Афанасьев К.Е. Численные методы в гидродинамике: Учеб. пособие / Чуваш. ун-т. им. И.Н. Ульянова. Чебоксары: ЧГУ, 1987. 94 с.
2. Sukumar N., Moran B., Belytschko T. The natural element method in solid mechanics. *Int J Num Methods Eng* 1998;43(5):839-887.

Исследование клеточно-автоматной модели процесса формирования устойчивых образов и её параллельной реализации

А. М. Фенстер

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирский государственный университет, Новосибирск

В последние годы активно изучаются устойчивые образы, проявляющиеся в самых различных областях физики, химии, биологии. В частности, эти образы используются при компьютерном моделировании процессов в пористых материалах.

Эксперименты, которые необходимо ставить для изучения таких образов, могут быть достаточно сложными. Поэтому важно иметь возможность компьютерного моделирования процессов формирования устойчивых образов. Наряду с традиционными моделями, основанными на численном решении дифференциальных уравнений, с середины 80-х годов XX века изучается возможность такого моделирования с использованием клеточных автоматов. В частности, были предложены клеточные автоматы, моделирующие такие физические и химические процессы, как диффузия, разделение фаз, реакция Белоусова—Жаботинского.

В данной работе изучаются результаты моделирования, полученные при эволюционировании клеточных автоматов с использованием взвешенных шаблонов. Изучается процесс преобразования начальной конфигурации клеточного массива к устойчивому состоянию; определяются зависимости свойств устойчивого состояния и времени его получения от весовых коэффициентов в шаблоне и начальной конфигурации клеточного массива. В связи с тем, что сложность вычислений возрастает с размерами клеточно-автоматного массива и увеличением количества шагов в процессе эволюции автомата, необходимых для достижения устойчивого состояния, реализована параллельная версия для получения результатов моделирования на ГПУ, а также изучена эффективность данного распараллеливания для различных параметров моделирования.

Одной из практических целей настоящей работы является создание комплекса программ для получения с помощью клеточных автоматов образов, моделирующих различные структуры пористых сред для исследования свойств этих сред.

Литература

1. Бандман О. Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики. ИВМиМГ СО РАН, 2005.

2. Leon O. Chua. CNN: A Paradigm for Complexity. World scientific series on nonlinear science. Series A, vol. 31.

3. Ванга В. К. Диссипативные структуры в реакционно-диффузионных системах. Москва;—Ижевск, 2008.

Параллельная программа для трехмерного моделирования аномальной теплопроводности в высокотемпературной плазме

А.В. Снытников

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

На основе метода частиц в ячейках проводится трехмерное численное моделирование релаксационных процессов распространения электронного пучка в высокотемпературной плазме. Параллельная реализация созданного трехмерного алгоритма выполнена с использованием эйлерово-лагранжевой декомпозиции области. Представлена методика определения температуры и коэффициента теплопроводности плазмы, доказана ее корректность. Показано, что наблюдаемое в расчетах формирование областей с малым потоком энергии электронов связано с понижением электронной теплопроводности. Релаксация пучка сопровождается понижением коэффициента электронной теплопроводности в $10^2 - 10^3$ раз.

Изучен процесс возбуждения колебаний плазмы в вычислительном эксперименте, выяснено, какие именно волны возникают в плазме под влиянием пучка, от чего зависит их амплитуда. Показано, что при релаксации пучка большая доля его энергии переходит в плазменные волны, распространяющиеся перпендикулярно движению пучка. Поэтому необходимо обеспечить достаточно подробную сетку не только в продольном (вдоль движения пучка), но и в поперечном направлении, так как именно поперечные колебания являются причиной возникновения модуляции плазмы.

Таким образом, показано, что без использования суперЭВМ явление аномальной теплопроводности в плазме изучено быть не может. Модуляции плотности были получены на сетке размером 128 узлов по каждому из трех измерений. При уменьшении числа узлов в поперечном направлении до 64 модуляции сохраняются, хотя изменяется набор возбуждаемых в плазме волн, при дальнейшем уменьшении числа узлов модуляции пропадают даже и при сохранении подробной сетки в продольном направлении.

Также приведены результаты анализа производительности параллельной программы на различных суперЭВМ, время работы, ускорение и

эффективность распараллеливания отдельных частей программы. Исследована эффективность использования ресурсов суперЭВМ.

Результаты расчетов показали, что в результате релаксации электронного пучка возникают модуляции плотности модельной плазмы с амплитудой до 300 %. Кроме того, в модельной плазме возникают изолированные друг от друга области с ненулевым потоком энергии, так что в целом поток энергии через область близок к нулю.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, гранты 08-01-615 и 08-01-622, гранта Президента РФ № МК-3562.2009.9 а также интеграционных проектов СО РАН № 103 и № 113.

Распараллеливание итерационных методов решения разностной задачи Дирихле для уравнения Пуассона и анализ эффективности полученных параллельных реализаций

Е.А. Данилкин, А.В. Старченко

Томский государственный университет, Томск

За последнее десятилетие произошел большой скачок в развитии вычислительной техники, на смену постоянному увеличению тактовой частоты процессора пришли идеи параллельной обработки данных и использования многоядерных процессоров и многопроцессорных компьютеров. В США, лидере суперкомпьютерного рынка, уже построен петафлопный суперкомпьютер Roadrunner, использующий помимо идеи параллельной обработки данных комбинацию процессоров AMD Opteron и IBM Cell. Естественно возникает вопрос, а современные численные методы переносятся на новые вычислительные машины, заложен ли в используемых нами методах параллелизм.

В данной работе обсуждается параллельная реализация трех методов решения систем линейных алгебраических уравнений: метода Зейделя, метода сопряженных градиентов и явного метода Булеева. Сразу необходимо отметить, что в случае использования последовательных алгоритмов наилучшие результаты по количеству итераций, времени вычислений и монотонности сходимости показывает явный метод Булеева, за ним идет метод сопряженных градиентов и затем метод Зейделя.

Использование последних рассчитанных значений в методе Зейделя увеличивает скорость сходимости, но ограничивает параллелизм алгоритма и требует синхронизации параллельных вычислений. Как приемлемая альтернатива используется обход узлов вычислительной сетки в шахматном порядке, что снимает вопрос о синхронизации вычислений. Важно,

что такая реализация алгоритма на МВС целиком сохраняет свойство последовательного алгоритма и очень хорошо масштабируется на любое разумное количество вычислительных узлов.

Параллельная реализация метода сопряженных градиентов для систем с ленточными матрицами так же не нарушает свойств последовательного алгоритма. Но на практике обнаруживается, что количество итераций случайным образом меняется при различных способах декомпозиции. Численные эксперименты показали, что это является следствием некоммутативности в случае машинной арифметики вычисления суммы большого количества слагаемых. Появляется небольшая погрешность в седьмом или восьмом знаке, что в дальнейшем приводит к изменению хода итерационного процесса. Необходимо отметить, что сам итерационный процесс в конце концов сходится, лишь незначительно меняется получение последовательности приближений к решению.

Решение сеточных уравнений методом Булеева при 2D и 3D декомпозиции оказывается невозможным, так как использование этого метода подразумевает многократный переход от одного узла расчетной сетки к другому через всю расчетную область. Идея преодоления этой проблемы состоит в следующем: прямой и обратный ход метода Булеева организуется не по всей области, а по подобластям получившимся в результате декомпозиции расчетной области. Таким образом, получается асинхронный метод, в котором на границе подобластей декомпозиции используются данные с предыдущей итерации. Показано, что при применении данного подхода количество итераций возрастает незначительно (10 %).

На основе полученных результатов можно сделать вывод, что более быстрые алгоритмы (а более быстрыми они являются за счет использования внутренних свойств решаемой системы) являются более связанными (неявными) и хуже поддаются распараллеливанию. Обнаружено, что при использовании большого количества вычислительных узлов (около 100) метод Зейделя требует времени для расчетов не больше чем в два раза, по сравнению с методом сопряженных градиентов, в то время как свойства метода Булеева не позволяют использовать такое количество процессорных элементов.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы «СКИФ_ГРИД» №2009–СГ–04/5.

Моделирование очистки воды от механических примесей методом дискретных элементов

Е.Н. Дьяченко

Томский государственный университет, Томск

Суперкомпьютерное моделирование находит применение при изучении процессов седиментации и фильтрации частиц механической примеси, которое позволяет понять физику процессов, дает возможность улучшить степень и скорость очистки воды, увеличивать время работы фильтров без дорогостоящих процедур регенерации и удешевлять строительство очистных сооружений за счет выбора оптимальных размеров и фильтрационных материалов.

При моделировании процессов очистки воды, седиментации и фильтрации необходимо учитывать движение множества частиц примесей различной формы и размеров в водной среде. Суперкомпьютерное моделирование при этом целесообразно проводить методом дискретного элемента, изначально предложенном Кундаллом и Стреком [1] для задач механики горных пород, и впоследствии модифицированном в работах [2-3] для приложения к задаче осаждения частиц.

Суть метода дискретного элемента заключается в двойном численном интегрировании уравнения движения (второго закона Ньютона) для каждой частицы.

Поскольку необходимо рассчитывать взаимодействие всех частиц со всеми, то вычислительная сложность метода пропорциональна квадрату количества рассматриваемых элементов, что значительно ограничивает либо продолжительность моделируемого физического процесса по времени, либо количество частиц.

Обозначенная задача в точной постановке сложно поддается математической формализации (в частности, возникает множество проблем при описании частиц сложной и разнообразной формы) и является крайне ресурсоемкой, поэтому в модели используются следующие упрощенные представления: не учитывается сложный характер движения жидкости между частицами; полагается, что все частицы имеют сферическую форму; частицы взаимодействуют при контакте друг с другом.

Максимальное количество частиц, которое удастся просчитать на кластерном суперкомпьютере СКИФ Cyberia с пиковой производительностью 12 ТФлопс в течение суток, - около одного миллиона при продолжительности физического процесса порядка 100 секунд.

Литература

1. Cundall P.A., Strack O.D.L., A distinct element model for granular assemblies // *Geotechnique*, 29:47–65., 1979.
2. Дик И.Г., Дьяченко Е.Н., Миньков Л.Л. Моделирование случайной упаковки шаров // *Физическая мезомеханика*. 2006. Т.9, №4. С. 63-69.
3. Neesse T.h., Dueck J., Djatchenko E. Simulation of filter cake porosity in solid/liquid separation // *Powder Technology*. – 2009.– N 193. – P. 332–336.

Реализация решателя квантифицированных булевых формул на графическом процессоре

И.Е. Ефремов

Институт систем информатики им. А.П. Ершова СО РАН, Новосибирск

Одной из фундаментальных проблем человечества является проверка истинности. Широко известный частный случай этой проблемы – задача выполнимости булевских формул (так называемая SAT-задача), активно исследуемая в течение последних десятилетий. Важнейшей причиной подобного интереса является широкий спектр прикладных задач, сводимых к различного рода SAT-задачам: в число областей применения входят искусственный интеллект, верификация моделей программ, разработка аппаратного обеспечения. Вместе с тем, существует множество практических задач, которые естественным образом описываются в терминах выполнимости квантифицированных булевских формул (Quantified Boolean Formulas, QBF).

Однако, несмотря на успех многих SAT-проектов, исследование проблемы выполнимости QBF (QSAT-проблема) все еще находится в начальной стадии. Это вызвано значительно большей трудоемкостью QSAT-проблем, в частности, ее PSPACE-полнотой.

Типичным подходом к ускорению SAT-решателей является использование новых высокоуровневых алгоритмических оптимизаций и эвристик для классической процедуры поиска Дэвиса-Путнам (DPLL). Ускорение и улучшение решателей квантифицированных формул (QBF-решателей) на сегодняшний день достигается применением разнообразных средств решения, например, использованием специальных модификаций базового для SAT алгоритма DPLL, применением метода резолюций, генетических алгоритмов и т. д. Однако, подавляющее большинство как тех, так и других решателей являются последовательными программами, неспособными полностью использовать вычислительную мощность современного аппаратного обеспечения.

Поэтому становится актуальным направлением в решении крупномасштабных вычислительных задач (SAT и QSAT в частности) использо-

вание вычислителей с нестандартной, параллельной архитектурой: графических ускорителей, процессоров специального назначения (таких как PowerXCell8i), гетерогенных суперкомпьютеров. Подобное аппаратное обеспечение характеризуется высокой эффективностью (так например современная графическая карта может обеспечивать производительность в один терафлопс) и, в то же время, высокой сложностью создания программных продуктов, способных полностью использовать доступные вычислительные мощности.

В предлагаемой работе был выполнен эксперимент по реализации классического алгоритма DPLL на графические процессоре (GPU) Nvidia и использованию его для решения задачи QSAT для ограниченного класса формул. Выбор целевой платформы был обусловлен высокой пиковой производительностью видеокарт, на порядок превышающей производительность стандартных центральных процессоров. При этом, дополнительными факторами являются цена и распространенность – GPU Nvidia являются доступными вычислительными устройствами, стоимость которых не превышает 1000\$. Полученные результаты позволяют утверждать, что даже простой массивно-распараллеленный алгоритм, реализация которого платформенно-зависимо оптимизирована, является более быстрым чем некоторые современные QSAT-решатели, основанные на сложных последовательных алгоритмах.

Работа поддержана грантом РФФИ № 09-01-00361-а.

Использование высокопроизводительных вычислений для оптимизации решения задач фармакопротеомики

Б.В. Шилов, К.В. Горемыкин, С.А. Проханов

Сибирский государственный медицинский университет, Томск

Томский государственный университет, Томск

В настоящее время использование скрининговых методов изучения взаимодействий активных центров белков с различными фармакофорами *in silico* является неотъемлемой частью поиска или разработки новых лекарств. Технология *in silico* (аналог метода *in vitro*), применяемая в биоинформатике, позволяет осуществить процедуру молекулярного докинга. Одним из перспективных направлений являются ее применение для исследования биологически активных веществ природного происхождения, поскольку на сегодняшний день отмечается увеличение потребительского интереса к ним. Известно, что в мире почти 40% фармацевтической продукции изготавливается из лекарственных растений. По различным данным, на территории Российской Федерации в медицинской практике ис-

пользуется более, чем 600 лекарственных препаратов на основе растительного сырья.

В период 2007-2009 г.г. нами были запланированы и реализованы ряд проектов в области скринингового докинга компонентов биологически активных веществ природного происхождения в центры связывания молекул, играющих ключевую роль в реализации противовоспалительного, иммунного и противоопухолевого ответов организма человека. Для решения таких задач существует широкий спектр программного обеспечения. Одной из наиболее часто цитируемых в литературе программ подобного рода является AutoDock, в основе работы которой лежит генетический алгоритм расчета межмолекулярных взаимодействий.

Программа AutoDock была использована в наших исследованиях для расчетов взаимодействий лигандов с белками в условиях различного микроокружения. Поскольку растительные извлечения представляют собой сочетания лигандов, каждый из которых может являться полипотентным активатором или ингибитором ряда мишеней, цель работы состояла в изучении каждого из них в отдельности. Для этого нами были разработаны сценарии к программе AutoDock для параллельного вычисления докингов множества лигандов и ее запуска на кластере СКИФ Cyberia. Созданные сценарии позволили ввести в модели белков гибкие (подвижные) элементы активного центра, и оценить взаимодействие лиганда с ними, что является качественным приближением к условиям *in vivo*.

В результате исследований получены данные о взаимодействии ряда лигандов из библиотеки ксантинов в активный центр МЕК-киназы, что говорит о перспективе поиска в этой группе веществ растительного происхождения новых противоопухолевых средств. Выявлено наличие иммунопрофилактического действия биофлавоноида кверцетина и его метаболитов, как лигандов, активирующих сигнальные молекулы начальных этапов формирования воспалительной и иммунной реакции. Показан механизм противоопухолевого эффекта действующих веществ лианы *Uncaria tomentosa*: как показали расчеты, оно опосредовано взаимодействием с активным центром рецепторов апоптоза DR3 и DR5. Кроме того проведен ряд исследований в области иммунофармакологии в рамках изучения и разработки новых лекарств.

Таким образом, исследования свойств фармакофоров с применением высокопроизводительных вычислений и специализированных программ имеют большое прикладное значение. Они позволяют оптимизировать процедуру разработки лекарств, сузив спектр взаимодействующих агентов, а также визуализировать процесс взаимодействия лиганд-мишень.

Программное обеспечение задач моделирования отраженного от поверхности Земли солнечного излучения

М.Ю. Катаев, И.В. Бойченко

Томский госуниверситет систем управления и радиоэлектроники, Томск

Исследования параметров атмосферы в настоящее время выходят на новый качественный (методики и алгоритмы расчетов) и количественный уровни (априорная информация о параметрах). Существующие наборы данных как полученных с поверхности Земли, так и из космоса позволяют оценивать состояние атмосферы в глобальных масштабах с периодичностью несколько раз в сутки. Эти предпосылки позволяют уверенно решать фундаментальные задачи, которые возникают на уровне как отдельных регионов, в частности Западной Сибири, так и конкретной выбранной пространственной точки (станции). Важную роль в формировании различных атмосферных процессов играет газовый состав атмосферы. Изучение вариаций профилей концентрации газового состава очень важно при решении как климатических, так и экологических задач. Для того, чтобы решение обратной задачи обработки спутниковых данных было бы эффективным, необходимо проводить предварительные численные расчеты прямой задачи (модельных спутниковых сигналов).

Нами разрабатывается программная система RAD, которая на основе накопленных и систематизированных данных о состоянии атмосферы (например, данные National Center Environmental Prediction) позволит для любой географической точки поверхности Земли и любого времени суток получать необходимую информацию для решения той или иной физической задачи или просто визуализации. Создание подобной системы является сложным как по управлению данными (различные форматы записи, большие объемы), так и по предоставлению этих данных для программ, решающих физические задачи (разные конфигурации входных и выходных параметров). В настоящее время, программа позволяет проводить расчеты прямой задачи на локальном компьютере. Однако, ввиду того, что расчеты сигналов для некоторой траектории полета или пространственной области могут содержать сотни, а то и тысячи точек, в которых необходимо рассчитать спутниковый сигнал, такой подход не продуктивен.

Нами проведена работа по адаптации программной системы RAD для запуска на вычислительном кластере в параллельном режиме. Проведен вычислительный эксперимент по моделированию отраженного от поверхности Земли солнечного излучения в ближней ИК области спектра, регистрируемого вдоль некоторой трассы полета спутника.

Программная система RAD изучается и применяется в дисциплинах «Обработка экспериментальных данных на ЭВМ» и «Параллельное программирование» в рамках программы подготовки инженеров по специальности «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем»

Параллельная реализация на суперЭВМ модели гравитирующей газопылевой системы

С.Е. Киреев

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Численные модели и их реализации, используемые для исследования различных астрофизических задач, должны удовлетворять специальным требованиям. Например, при исследовании движения материи в галактиках или процессов образования планет в протопланетных дисках необходимо учитывать несколько различных физических процессов и рассматривать явления на разных пространственных и временных масштабах. Программа для численного моделирования должна быть способна использовать большие вычислительные мощности, то есть работать на параллельных вычислительных системах.

В работе рассматривается параллельный трехмерный код для моделирования астрофизических объектов, таких как галактики и протопланетные диски. Используемая модель включает самогравитирующие газовую и пылевую компоненты, а также трение между ними. Сложность параллельной реализации заключается в необходимости совмещать несколько различных физических процессов и использовать различные численные методы для их моделирования.

Пылевая компонента галактики или протопланетного диска описывается бесстолкновительным уравнением Власова, которое решается методом частиц-в-ячейках. Газовая компонента описывается системой уравнений газовой динамики. Для ее моделирования используется метод крупных частиц (FLIC). Распределение гравитационного потенциала удовлетворяет уравнению Пуассона, которое решается методом быстрого преобразования Фурье по трем направлениям. Для дискретизации пространства используется равномерная декартова сетка, что дает одинаковые свойства пространства во всей области моделирования.

Основная проблема при параллельной реализации метода частиц-в-ячейках состоит в необходимости хранить модельные частицы и участок сетки из одной области пространства в одном процессорном элементе.

Возникает опасность, что все частицы могут собраться в одной подобласти, что может сильно ограничить масштабирование задачи. Данная проблема была решена с помощью специального способа декомпозиции, совмещающего декомпозицию пространства с распределением частиц каждой подобласти по нескольким процессорам. Число процессоров для обработки подобласти зависит от числа частиц в этой подобласти. Для начального задания и поддержки в процессе счета оптимального распределения процессоров по подобластям был реализован алгоритм балансировки.

Распараллеливание явного конечно-разностного метода крупных частиц для решения уравнений газовой динамики выполнено естественным образом путем декомпозиции пространства моделирования. Параллельное быстрое преобразование Фурье при решении уравнения Пуассона выполняется с помощью библиотеки FFTW, которая сама задает способ декомпозиции. Таким образом, на каждом шаге по времени приходится дважды делать перераспределение сеточных значений между процессорами: перераспределение значений плотности вещества перед решением уравнения Пуассона и значений гравитационного потенциала после него.

Реализованный трехмерный код позволяет выполнять расчеты на сетках порядка $500 \times 500 \times 500$ ячеек и использовать 1 млрд. модельных частиц. При увеличении числа используемых процессоров имеет место ускорение счета.

Параметрический метод декомпозиции решения многомерных краевых задач

В.П. Ильин, Д.В. Кныш

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Рассматривается параметрический двухуровневый итерационный метод декомпозиции областей, соответствующий использованию краевых условий различных типов на смежных границах подобластей. Внутренние итерации в каждой подобласти (выполняемые одновременно на соответствующем процессоре) и внешние – между подобластями – осуществляются на основе различных вариационных методов в подпространствах Крылова. Обсуждаются различные варианты декомпозиции: одно-, дву- и трехмерные, с пересечением подобластей или без них, с использованием различных критериев окончания внутренних итераций. Проводится экспериментальное исследование эффективности алгоритмов распараллеливания при разных значениях параметров граничных условий на разном количестве

процессорных узлов и ядер, с использованием средств MPI, OpenMP и гибридного программирования.

Распараллеливание обработки звука с использованием графического процессора на основе технологии CUDA

А.В. Невидимов

Томский государственный университет, Томск

В настоящее время преимущества параллельной обработки данных становятся все более доступными для пользователей обычных ПК; много-ядерные процессоры перестали быть редкостью. Подобные возможности имеются и у современных графических процессоров – так, относительно бюджетная видеокарта NVIDIA GeForce 9800 GTX включает в себя 128 потоковых процессоров, работающих на частоте 1688 МГц. Возможность использования графического процессора для задач общего назначения (GPGPU, General-Purpose Computing on Graphics Processing Units) впервые была проанализирована в 2004 году компанией NVIDIA. Логическим завершением этого исследования был выход технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture) в 2007 году. Данная технология позволяет применять всю вычислительную мощь современных видеокарт с использованием несколько модифицированного языка C. Таким образом, для начала разработки на CUDA не требуется изучение другого языка, непривычных структур данных (как, например, в HLSL - High Level Shader Language), что сокращает время (и стоимость) разработки программ, исполняющихся на GPU.

Данная работа посвящена использованию графического процессора для эффективной обработки звука. Существуют множество вычислительно сложных задач, связанных с преобразованием аудиоданных – к примеру, устранение шума. В литературе такое применение CUDA не описано, хотя перспективность подобных исследований очевидна: задачи обработки звука могут быть эффективно распараллелены. Рассматривается возможность создания основанной на CUDA библиотеки, подключаемой к существующим аудиоредакторам.

Экспериментальный сравнительный анализ МКЭ и МКО для моделирования трехмерных гармонических электромагнитных полей

Д.С. Бутюгин, А.В. Петухов

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Экспериментально исследуется и сравнивается эффективность различных численных аппроксимаций для решения трехмерной краевой задачи электромагнетизма в частотной области. Дифференциальные и вариационные постановки, как в терминах электрического поля, так и в терминах векторного и скалярного потенциалов, с различными типами граничных условий (электрическая стенка и волновой порт) аппроксимируются на неструктурированных сетках соответственно методами конечных объемов (МКО) и конечных элементов (МКЭ). МКО применяется для барицентрических ячеек Вороного, с вычислением локальных матриц баланса и сборкой глобальной матрицы системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). В МКЭ скалярные и векторные базисные функции строились на тетраэдральных элементах. Полученные вещественные несимметричные и комплексные симметричные знако-неопределенные СЛАУ решались различными предобусловленными итерационными методами в подпространствах Крылова. Неполная факторизация с модификацией Айзенштата и другие предобуславливающие матрицы комбинировались с методами полусопряженных невязок (SCR), бисопряженных градиентов с локальной стабилизацией (BiCGStab) и другими алгоритмами в подпространствах Крылова. Представлены результаты экспериментов для представительного набора модельных задач демонстрирующие работу предложенных алгоритмов. Вычислительные технологии включают распараллеливание и использование программного инструментария Mathematical Kernel Library of Intel (MKL).

Параллельные итерационные методы переменных направлений для решения трехмерного диффузионно-конвективного уравнения

Н.В. Панченко, Д.В. Первозкин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Целью данной работы была разработка, реализация и экспериментальное исследование параллельных алгоритмов для итерационного реше-

ния симметричных и не симметричных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с разреженными матрицами высокого порядка (до десятков и сотен миллионов), возникающими при сеточных аппроксимациях трехмерных краевых задач.

Применение прямых методов решения СЛАУ для рассматриваемых случаев является нецелесообразным или вообще невозможны ввиду их высокой ресурсоемкости. Современные эффективные итерационные процессы основаны на предобусловленных методах сопряженных или полусопряженных направлений в подпространствах Крылова. Однако здесь проблема заключается в том, что наиболее быстрые предобусловленные методы практически не распараллеливаются, поскольку их реализация связана с решением вспомогательных СЛАУ с треугольными матрицами.

В данной работе рассматривается новый метод ASSOR – альтернирующий метод симметричной последовательной верхней релаксации, являющейся обобщением известного алгоритма SSOR и связанных со специальной упорядоченностью узлов сетки и соответствующих неизвестных. Образно говоря, на каждой итерации счет ведется одновременно от разных углов расчетной области в направлении к ее центру. На матричном языке формулы методов ASSOR и SSOR являются одинаковыми, однако при разных упорядоченностях векторных компонент соответственно переопределяются нижняя и верхняя треугольные части матричного представления линейного оператора решаемого уравнения. Предлагаемые алгоритмы можно назвать также многофронтальными вариантами методов неполной факторизации, или неполного LU – разложения. Были реализованы алгоритмы для решения трехмерного диффузионно-конвективного уравнения в параллелепипеде с граничными условиями Дирихле. Рассматриваются двухпоточковый, четырехпоточковый и восьмипоточковый варианты метода ASSOR. Ускорение итерационных процессов осуществляется методами сопряженных или полусопряженных градиентов, для симметричных и не симметричных матриц СЛАУ соответственно. Эксперименты проводились на 8 процессорной вычислительной системе с использованием средств систем OpenMP и MKL.

Проведенный анализ расчетов для различных сеток и значений конвективных коэффициентов исходного уравнение позволяет делать предварительные выводы о перспективности рассматриваемого подхода, а также целесообразность исследования в данном направлении.

MPI-IO: Практические аспекты разработки масштабируемых приложений

Б.Л. Петушкев

Томский государственный университет, Томск

Производительность и доступность вычислительных кластеров в России растет очень быстрыми темпами, предоставляя возможность исследователям провести численный эксперимент в гораздо меньшие сроки и с, например, более мелкой разностной сеткой. В то же время кластер позволяет не только решать текущие задачи быстрее, но и ставить другие, ранее недоступные в силу высоких временных затрат и ряда ограничений техники. Однако этот качественный переход требует изменения подхода к программированию по причине возрастающих объемов результирующих данных. MPI, являясь стандартом де-факто для вычислительных систем с распределенной памятью, с момента публикации второй версии в 1997г. предоставляет средства высокоэффективного параллельного ввода/вывода. Часто при проектировании приложений для решения больших задач данной возможностью пренебрегают из-за чрезмерного усложнения кода в целом.

В работе представлены результаты практического использования MPI-IO в контексте моделирования процесса фильтрации газа через пористую среду шахтных выработок. Рассматриваются вопросы проектирования, масштабирования программы и производительности файловой подсистемы PanFS от компании Panasas. PanFS используется на всех кластерах, созданных по суперкомпьютерной программе "СКИФ" Союзного государства.

Проблематика решаемой физической задачи заключается в том, что образующиеся в выработках угольных шахт участки обрушенного пространства становятся потенциально опасным очагом выделения и скопления метана. Последний в определенной концентрации образует с воздухом взрывоопасную смесь. Подобная задача представляет собой типичный, особенно в многомерном случае с большим количеством ячеек сетки, пример требовательной к ресурсам компьютера области численного моделирования.

Представленная модель может быть использована для оперативного прогноза качества воздуха в выработках, поскольку её применение обеспечивает высокую скорость получения результатов при достаточно хорошей точности предсказания. Все работы проводились на базе кластера СКИФ-Cyberia МВЦ ТГУ.

При финансовой поддержке РФФИ №08-08-12029-офи.

Out-of-core PARDISO* – параллельный прямой решатель Intel® MKL больших разреженных систем линейных уравнений

С.А. Соловьев, С.Г. Пудов
Intel® Corporation, Новосибирск

Intel® Math Kernel Library PARDISO* – это параллельный прямой решатель из библиотеки Intel® MKL, который позволяет эффективно решать разреженные СЛАУ на многоядерных системах с использованием современных математических алгоритмов, а также архитектурных особенностей Интеловских процессоров. Процесс решения СЛАУ с помощью PARDISO* состоит из трех этапов: переупорядочивание матрицы A , факторизация (LU-разложение измененной матрицы A') и решение полученной системы $LUx=y$. На первом этапе столбцы и строки исходной матрицы переставляются таким образом, чтобы максимально распараллелить этап факторизации, а также оптимизировать использование оперативной памяти для хранения LU факторов. Однако при решении очень больших СЛАУ LU факторы уже не помещаются в оперативную память, что требует модификации исходного алгоритма с учетом использования свободного дискового пространства.

В Intel® MKL на основе PARDISO* реализована версия out-of-core (ООС) PARDISO*, позволяющая решать такие задачи. Основная проблема в реализации ООС алгоритма состоит в том, что время доступа к данным на диске существенно выше по сравнению с доступом к оперативной памяти. Поэтому на производительность алгоритма влияет не только скорость счета, но и время работы с диском. Обмен данными с диском зависит как от структуры матрицы, так и от соотношения общей памяти, требуемой для решения задачи, к имеющейся оперативной. Таким образом, производительность ООС алгоритма можно улучшать как ускорением вычислений, так и оптимизацией работы с диском.

В Intel® MKL ООС PARDISO* разработан алгоритм, оптимально использующий доступную оперативную память. В частности, в нем данные, загруженные в память, анализируются и реорганизовываются путем удаления ненужных частей с их последующим уплотнением с целью уменьшения фрагментации данных. Это позволило значительно уменьшить число обращений к жесткому диску.

Также, для сокращения числа операций с диском, была добавлена возможность совмещения процесса факторизации и прямого шага решения: $Lz=y$. В этом случае, после нахождения некоторого столбца матрицы L можно вычислить соответствующую часть z . Таким образом, примерно в два раза сокращается число операций с диском на этапе решения.

Помимо предложенных оптимизаций работы с диском, OOC версия использует динамическую OMP параллелизацию этапа факторизации. Этот высокоуровневый алгоритм основан на одновременном разложении нескольких столбцов исходной матрицы. Теоретически, по сравнению с In-Core алгоритмом PARDISO*, масштабируемость OOC не может достигнуть 2 при переходе от одного на два процессора и 4 с одного на четыре. Несмотря на это, результаты тестирования показали высокую масштабируемость предложенного алгоритма, которая достигает соответственно 1,8 и 2,9. Исследования производительности показали, что параллельный OOC PARDISO* демонстрирует в большинстве случаев лучшие результаты по сравнению с основными конкурентами, такими как TAUCS и MUMPS.

Высокопроизводительные вычисления на SMP-машинах и графических процессорах (GPU)

Д.В. Деги

Томский государственный университет, Томск

Высокопроизводительные вычислительные устройства в настоящее время являются очень актуальными в плане решения прикладных задач, в которых необходимо обработать большие массивы информации за как можно короткое время. Используя хорошее системное и прикладное ПО для работы с соответствующей архитектурой вычислительного устройства, можно получить значительное ускорение программ.

Одним из наиболее популярных средств программирования для компьютеров с общей памятью, является технология OpenMP. За основу берётся последовательная программа, а для создания её параллельной версии пользователю предоставляется набор директив, функций и переменных окружения.

В недалеком прошлом компанией NVIDIA была создана технология Compute Unified Device Architecture (CUDA), дающая доступ к вычислительным ресурсам графических процессоров. Используя ручной труд программиста, можно получить на GPU (применяя технологию CUDA) ускорение программ с очень большими вычислениями, на порядок выше, чем на многоядерных процессорах.

В данной работе рассматриваются применение системы OpenMP и технологии CUDA для решения задач вычислительной математики. Распараллеливаются программы для вычисления определенного интеграла, умножения матриц, решение СЛАУ методом Якоби. При этом получившиеся параллельные алгоритмы значительно быстрее последовательных.

Численное моделирование гравитирующих газовых систем на суперЭВМ

Г.Г. Лазарева

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

В докладе представлены результаты разработки параллельной программы для моделирования динамики самогравитирующих газовых структур на многопроцессорных компьютерах с распределенной памятью. Модель основана на решении системы уравнений газовой динамики, дополненной уравнением для внутренней энергии и уравнением Пуассона для гравитационного потенциала. Исходная система газодинамических уравнений решается методом крупных частиц с коррекцией баланса энергий. Задача решалась с учетом вращения, самосогласованного гравитационного поля, центрального тела сложной геометрии, с учетом температуры газа, в трехмерной постановке в декартовых координатах. Созданная параллельная реализация позволяет получать адекватные результаты для трехмерной модели гравитационной газовой динамики. Главные трудности при этом состоят в вычислении гравитационного потенциала, который задается трехмерным уравнением Пуассона и правильным распределением массивов сеточных переменных между процессорными элементами. Тестовые вычисления, проведенные на суперкомпьютерах НКС-160 ССКЦ СО РАН, МВС-6К МВСКЦ РАН показали, что при решении системы уравнений газовой динамики линейного ускорения не происходит, т.к. имеет место насыщение в результате обменов. Реализация трехмерной модели гравитационной газовой динамики на многопроцессорной вычислительной системе позволило использовать для расчетов подробные сетки, а следовательно дало возможность решать более широкий класс задач.

Целью работы является численное моделирование столкновения газовых компонент двух одинаковых дисковых галактик в процессе центрального столкновения последних в полярном направлении. Движение галактик в плотных скоплениях превращает столкновения между ними в важный эволюционный фактор, поскольку за хаббловское время рядовая галактика может испытать до десятка столкновений с другими галактиками своего скопления. Наблюдательное и теоретическое изучение взаимодействующих галактик - незаменимый метод исследования их свойств и эволюции. Компьютерное моделирование является единственным инструментом, позволяющим выделить основные физические процессы и получить в ходе расчетов динамическую картину их влияния на эволюцию галактик.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ 08-01-00615 и 10-01-00016, Интеграционного проекта СО РАН № 103.

Алгоритм решения задач моделирования динамически нагруженных порошковых сред с использованием многопроцессорных вычислительных систем

А.О. Товтинец, Е.В. Жуков

Томский государственный университет, Томск

Российский государственный университет имени Иммануила Канта, Калининград

Применение параллельных вычислительных систем является перспективным и стратегически выгодным в области моделирования связанных процессов синтеза материалов и покрытий – условий установления теплового баланса, механической модификации реагирующих тел, обеспечивающей механическую активацию реагирующей смеси, макрокинетики химических превращений и возможной фильтрации расплава (газа). Свойства продуктов физико–химических превращений и структура получаемых композиционных материалов определяются структурой исходных порошковых компактов, пористостью, размерами порошковых частиц, режимами химических превращений, фазовыми переходами компонентов.

В качестве объекта исследования выбрана порошковая система Zr-B. Моделируется поведение порошкового смесового компакта, в котором реагирующие компоненты прошли предварительную механическую активацию. Исследуются физико-химические механизмы взаимодействия в порошковой смеси реагирующих компонентов и инертного наполнителя (продукта химических превращений) при динамическом нагружении порошковой среды.

Разработан алгоритм решения задачи моделирования динамически нагруженных порошковых сред на многопроцессорных вычислительных системах, который позволяет сократить время проведения вычислительных экспериментов и предоставляет возможность автоматизированной первичной обработки полученных результатов. Алгоритм может быть легко модифицирован для схожих задач, относящихся к классу распределенных вычислений.

Моделирование на вычислительном кластере динамики тонкого трубчатого замагниченного моноэнергетического пучка электронов

А.А. Трунов, А.В. Старченко, И.Ю. Турчановский, В.А. Шкляев
Томский научный центр, Томск

Создана параллельная реализация алгоритма решения задач динамики пучков заряженных частиц для самосогласованного электромагнитного поля методом "частицы-в-ячейках" в r - z геометрии. Для решения уравнений Максвелла используется явная разностная схема, обеспечивающая точное выполнение граничных условий для векторов электромагнитного поля на идеальном проводнике. Смещённые на половину шага в пространстве и времени равномерные сетки обеспечивают порядок аппроксимации по времени и пространству. Для интегрирования уравнений движения частиц используется широко распространённый алгоритм Бориса для осесимметричной задачи, основывающийся на алгоритме интегрирования с перешагиванием (leap-frog), который имеет второй порядок аппроксимации и сохраняет импульсы частиц. Вычисление сеточной плотности тока согласовано с изменением плотности заряда в ячейке эйлеровой сетки для выполнения закона Гаусса.

Поскольку для используемого количества частиц и пространственных сеток время вычисления электромагнитного поля много меньше времени интегрирования уравнений движения частиц, проведено распараллеливание только обработки частиц.

Параллельный алгоритм решения задачи разработан в рамках модели программирования SPMD (распараллеливание по данным). При параллельной реализации алгоритма использовался язык программирования Fortran 90 с библиотекой MPI.

Для улучшения производительности параллельной программы используется динамическая балансировка загрузки процессов, осуществляющаяся при помощи алгоритма регулирования инъекции частиц: максимальное число частиц, инжектируемых на данном шаге по времени, получает процесс, имеющий в расчётной области минимальное число частиц.

Решена задача о транспортировке тонкого трубчатого замагниченного моноэнергетического пучка электронов в эквипотенциальном цилиндрическом канале дрейфа. Полученное на кластере ТГУ СКИФ Siberia решение хорошо согласуется с решением рассматриваемой задачи PIC-кодами KARAT и OOPIC, а также с известным аналитическим решением.

Получена хорошая эффективность параллельной программы, рассчитанная как отношение реального ускорения к теоретическому, вычисленному в соответствии с законом Амдала.

Параллельная реализация вероятностного асинхронного клеточного автомата, моделирующего каталитическую реакцию окисления монооксида углерода (CO) на поверхности палладия (Pd₁₁₀)

А. Е. Шарифулина

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

В работе реализован параллельный алгоритм моделирования реакции окисления CO на катализаторе Pd₁₁₀ с помощью асинхронной вероятностной КА-модели и проанализирована пространственно-временная динамика реакции.

Известно, что каталитическая реакция окисления CO на поверхности палладия в неравновесных условиях может сопровождаться появлением автоколебаний и химических волн. Автоволны позволяют максимально долго поддерживать реакцию в активном состоянии без дополнительного подвода энергии. Причиной возникновения автоволн являются фазовые переходы в адсорбированных слоях вследствие периодического образования и расходования приповерхностного кислорода O_{sub}. Механизм реакции состоит в следующем. На поверхности Pd₁₁₀ адсорбируются кислород O₂ и CO, адсорбированные реагенты CO_{ads} и O_{ads} вступают в реакцию с образованием углекислого газа CO₂. Вследствие реакции O_{ads} → O_{sub}, O_{ads} может переходить в приповерхностный слой. Адсорбция O₂ на приповерхностный слой не возможна, что приводит к удалению покрытия O_{ads} и покрытию поверхности O_{sub}. Приповерхностный кислород O_{sub} может вступать в реакцию с CO_{ads} с образованием CO₂. При прямой адсорбции CO из газовой фазы на O_{sub} образуется комплекс CO_{ads}O_{sub}, который либо разлагается на исходные реагенты, либо десорбирует с образованием CO₂. Вследствие чего O_{sub} расходуется и поверхность вновь заполняется O_{ads}. Все описанные стадии реакции реализуются с определённой вероятностью и происходят асинхронно.

В КА-модели поверхность катализатора представлена клеточным массивом $\Omega(A, M \times N)$. $A = \{*, CO_{ads}, O_{ads}, [O_{sub}], [CO_{ads}O_{sub}]\}$ - алфавит состояний, где символ «*» обозначает свободный активный центр

поверхности размера $M \times N$, остальные состояния соответствуют веществам, участвующим в реакции окисления.

Поскольку реальной поверхности кристалла соответствуют массивы больших размеров, и для моделирования каталитического процесса требуется проводить вычисления в течение длительного периода времени, для решения задачи необходимо использовать эффективные параллельные алгоритмы. При распараллеливании асинхронного КА возникают определённые трудности, связанные с необходимостью обмена граничными значениями после обновления каждой клетки и с вероятностным выбором клеток. В связи с этим использовалась блочно-синхронная реализация асинхронного КА, которая позволяет достичь более высокой эффективности распараллеливания без изменения характера поведения модели. В блочно-синхронной реализации клеточный массив делится на непересекающиеся блоки. Размер блока больше либо равен числу соседей, значения которых используются в правилах переходов, в данном случае 3×3 (рис 1). Каждое из правил переходов синхронно применяется к клеткам с одинаковым номером во всех блоках, поскольку блоки не пересекаются, результат не зависит от порядка их обработки.

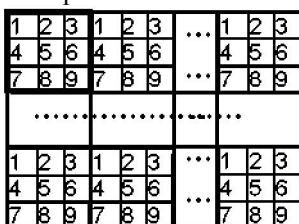


Рис 1. Разбиение КА массива на блоки.

Параллельный алгоритм моделирования реакции с помощью асинхронного вероятностного КА реализован на Новосибирском суперкомпьютере НКС-160 (ИВМиМГ СО РАН). В результате проведённых экспериментов получено линейное ускорение.

Численное моделирование нестационарных течений в гидротурбине на многопроцессорных системах

С.Г. Черный, Д.В. Чирков, Д.В. Банников, В.А. Скороспелов, П.А. Турук
 Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирский государственный университет, Институт математики СО РАН, Новосибирск

В [1] авторами предложены постановки и методы решения задач численного моделирования пространственных течений в турбомашинах.

Наиболее общей является постановка прямой задачи гидродинамики турбин, в которой моделирование нестационарного течения проводится во всём проточном тракте. Нестационарная постановка позволяет моделировать весь диапазон режимов работы гидротурбин (ГТ), в том числе и режимы неполной загрузки, учитывать взаимодействие ротора и статора турбины, описывать пульсации сил и моментов на лопатках, моделировать прецессирующий вихревой жгут за ротором и т.д.

Для расчёта потока строится многосвязная блочно-структурированная сетка, покрывающая весь проточный тракт турбины. На каждой итерации расчёт проводится во всех блоках с последующим обменом данных между соседними блоками. Итерации повторяются до тех пор, пока не будет найдено решение на текущем временном слое, затем происходит переход на следующий шаг по времени. Нестационарная постановка требует значительных вычислительных ресурсов, а повышение точности расчетов за счёт увеличения количества ячеек сетки приводит к нехватке оперативной памяти персонального компьютера. Например, расчет периодически нестационарного течения с прецессирующим вихревым жгутом на одном периоде (около трех оборотов РК) с использованием сетки, содержащей 1 млн. узлов, требует двух дней работы процессора Core2Duo 2.6 ГГц.

В настоящей работе внимание уделяется вопросу сокращения времени счёта нестационарных задач при помощи кластерных ЭВМ. Распараллеливание счета осуществляется распределением блоков расчетной сетки на процессоры кластера. Коммуникации осуществляются с использованием стандарта MPI. Проведен сравнительный анализ различных способов разбиения расчетной области по процессорам. Приводятся результаты ускорения счета, полученные на различных кластерах, на примере расчета нестационарного течения в турбине ГЭС Платановрисси (Греция).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 08-01-00364)

Литература

1. Черный С.Г., Чирков Д.В., Лапин В.Н., Скороспелов В.А., Шаров С.В. Численное моделирование течений в турбомашине. – Новосибирск: Наука. 2006. – 202 с.

Анализ параллельных реализаций МКЭ для моделей мелкой воды

Е.В. Дементьева, Е.Д. Карпова, В.В. Шайдуров

Институт математики Сибирского федерального университета, Красноярск
Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск

В работе рассмотрено численное моделирование поверхностных волн в больших акваториях методом конечных элементов на основе уравнений мелкой воды с учетом сферичности Земли и ускорения Кориолиса. Проведено исследование эффективности нескольких параллельных реализаций алгоритма, выполненных с помощью библиотеки MPI для языка Си. Численные эксперименты на высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных системах проводились на модельной прямоугольной сетке. Для реализации параллелизма по данным были разработаны алгоритмы декомпозиции вычислительной области с триангуляцией для в прямоугольнике на сфере. Приведены сравнительные результаты ускорения вычислений в зависимости от количества процессов, способа реализации коммуникаций (блокирующие, неблокирующие двухточечные обмены), способа декомпозиции вычислительной области, архитектуры суперЭВМ.

Проведена теоретическая оценка потенциального ускорения параллельных алгоритмов в зависимости от количества используемых процессов. Показано, что для достаточно мелких сеток оценка потенциального ускорения близка к линейной на достаточно большом диапазоне количества процессов.

Численные эксперименты показали, что использование неблокирующего режима обменов, которое допускается алгоритмом, является, безусловно, более эффективным. Поскольку в вычислительном плане рассмотренные варианты декомпозиции области равноценны, то следует отметить как явное преимущество простоту организации параллельного алгоритма при декомпозиции без теневых граней для неструктурированных триангуляциях реальных акваторий.

Расчеты были проведены на трех высокопроизводительных ВС различных архитектур. Показано преимущество однородного устройства кластера (СКИФ Cyberia T-Platform ТГУ и кластер Hewlett-Packard ИВЦ НГУ) над гетерогенным (кластер собственной сборки ИВМ СО РАН). Кроме того, продемонстрирована неустойчивость ускорения при неоднородном составе кластера, которая не присуща ни алгоритму, ни реализации.

Исследование времени выполнения обменов в неблокирующем режиме на реальных расчетах при однородной архитектуре кластера показало следующее:

- время обменов минимально и не зависит от количества процессов, участвующих в обменах, если загружены все ядра на узле (по одному процессу на ядро);
- при существовании в расчетах узлов, не полностью загруженных, время обменов тем больше, чем больше количество простаивающих ядер;
- время, затраченное на обмены, уменьшается с ростом количества задействованных процессов (т.е. уменьшением времени вычислений).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 08-01-00621-а) и Президентской программы «Ведущие научные школы РФ» (грант НШ-3431.2008.9).

Параллельные алгоритмы на графах

В.Н. Берцун, А.В. Бородин

Томский государственный университет, Томск

В данной работе рассматриваются некоторые параллельные алгоритмы на графах. Пусть дан ориентированный граф $G(V, E)$ и его матрица примыканий[1,2]

$$A_p^{(1)} = \begin{cases} w_{ij}, & \text{если } x_i x_j \in E \\ 0, & \text{если } i = j \\ \infty, & \text{если } x_i x_j \notin E \end{cases}, \text{ где } w_{ij} - \text{вес ребра из } x_i \text{ в } x_j.$$

Матрицу $A_p^{(2)}$, по матрице примыканий $A_p^{(1)}$, можно построить, находя элементы $A_p^{(2)}$ по формуле $a_{ij}^{(2)} = \min(a_{ik}^{(1)} + a_{kj}^{(2)})$.

Последовательно вычисляя $A_p^{(i)}, 2 \leq i \leq N$, где N - наименьшее 2^S (S - натуральное), которое превышает число вершин графа, уменьшенное на 1, получим матрицу кратчайших путей графа $A_p^{(N)}$.

Вершины, через которые проходят кратчайшие пути, можно найти по их длинам с помощью записи информации о самих путях (наряду с информацией о длинах путей). В этом алгоритме в дополнение к матрице весов хранится и обновляется целочисленная матрица $B = [b_{ij}]$, элемент b_{ij} которой указывает вершину, непосредственно предшествующую вер-

шине x_i в кратчайшем пути от x_i к x_j . Этой матрице присваиваются начальные значения $b_{ij} = i$ для всех i и j .

Обновление элементов матрицы B осуществляется по формулам:

$$b_{ij} = \begin{cases} b_{ij}, & \text{если } (a_{ik} + a_{kj}) < a_{ij}, \\ \text{неизменяется,} & \text{если } (a_{ik} + a_{kj}) \geq a_{ij}. \end{cases} ; i, j = \overline{1, n}.$$

После вычисления длин кратчайших путей, кратчайший путь между двумя вершинами x_i и x_j дается следующей последовательностью вершин $x_i, x_n, \dots, x_2, x_1, x_j$, где $x_1 = b_{ij}, x_2 = b_{ix_1}, x_3 = b_{ix_2}$ и так далее до тех пор, пока $b_{ix_n} = x_i$ для некоторого n .

Распараллеливание состоит в одновременном выполнении нескольких операций над исходными матрицами A и B . Укрупнение вычислений состоит в использовании ленточной схемы разбиения матрицы примыканий A и вспомогательной матрицы B .

Рассмотрен параллельный алгоритм вычисления характеристического уравнения матрицы смежности графа, который сводится к нахождению следов степеней этой матрицы.

Результаты расчетов, которые проводились на вычислительном кластере ТГУ, показали, что эффективность распараллеливания растет с увеличением числа процессоров.

Литература

- 1.Макконелл Дж. Анализ алгоритмов. Вводный курс / Дж. Макконел. – М.: Техносфера, 2002. – 304 с.
- 2.Кристофидес Н. Теория графов. Алгоритмический подход / Кристофидес Н. – М.: Мир, 1978. – 432 с.
- 3.Воеводин В.В., Воеводин В.В. Параллельные вычисления. СПб.: BHV, 2002. – 608 с.

Алгоритм распараллеливания в задаче расчета отраженного солнечного излучения от поверхности Земли в ближней ИК области спектра

М.Ю. Катаев, И.В. Бойченко, А.К. Лукьянов

Томский госуниверситет систем управления и радиоэлектроники, Томск

Во многих задачах оценки экологической обстановки или физики атмосферы необходимо знать концентрации газовых составляющих. Од-

ним из способов получения такой информации является измерение со спутников излучения в различных диапазонах спектра. В последнее время запущены несколько спутников, предназначенных для восстановления информации об общем содержании и высотном распределении газов, когда измеряемой величиной является отраженное от земной поверхности солнечное излучение. Нами разрабатывается программа «Спутниковый симулятор», которая позволяет рассчитывать спутниковые сигналы для всей поверхности Земли с учетом изменения многих параметров атмосферы по поверхности и во времени. Решение этой задачи является весьма затратной по времени, так как необходимо оперировать большими объемами данных. В докладе приводится анализ и алгоритм, позволяющий значительно ускорить расчеты, при применении идей распараллеливания, при работе программы на кластере.

Вариационное моделирование пространственных кривых с помощью кубических эрмитовых сплайн-вейвлетов

Н.К. Аркабаев, Б.М. Шумилов, Э.А. Эшаров, А.Ж. Кудуев

Ошский государственный университет, Ош, Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск

В процессе геодезических изысканий автомобильных дорог получают цифровую модель местности, которая содержит, в том числе, и дискретный аналог существующей трассы. Так как в процессе проектирования ведется разбивка трассы на пикеты, то удобнее выражать переменные координаты X, Y, Z точек этой трассы при помощи одного параметра l – текущей длины трассы, $0 \leq l \leq L$. В этом случае на любом интервале трасса дороги в плане и продольном профиле описывается единственным сочетанием трех функций: $x = \gamma_1(l), y = \gamma_2(l), z = \gamma_3(l)$ [1].

Одной из мер «гладкости» кривой служит полная кривизна: интеграл кривизны, взятый по длине кривой. В одномерном случае более простой вариант – интеграл квадрата второй производной, также можно использовать как достаточно хорошую меру «гладкости». Тогда формулировка задачи вариационного моделирования принимает вид: минимизировать $\int_0^L |\gamma_i''(l)|^2 dt$ при заданных ограничениях, для $i = 1, 2, 3$. Известно, что

решением этой задачи являются кубические сплайны гладкости C^2 [2].

В общем случае нахождение кривой с минимальной энергией, удовлетворяющей заданным ограничениям, осуществляется приближенно. Например, функция $\gamma_1(l)$ записывается так:

$$\gamma_1(l) = \sum_{j=1}^m (x1_j \varphi 1_j(l) + x2_j \varphi 2_j(l)) = \varphi(l)x, \quad \text{где}$$

$\varphi(l)=[\varphi 1_1(l), \dots, \varphi 1_m(l), \varphi 2_1(l), \dots, \varphi 2_m(l)]$ – базисные эрмитовы кубические сплайны. В докладе изучается возможность перехода к базису вейвлетов как более эффективному для поддержки интерактивного режима создания кривых вариационными методами.

Предложены новые типы эрмитовых сплайн-вейвлетов. В отличие от классических вейвлетов Чуи и Вонга эти вейвлеты имеют меньший носитель, а в отличие от построенных нами ранее вейвлетов [3], они обладают свойством биортогональности.

Работа выполнена при финансовой поддержке по проектам РФФИ №09-07-90900 моб_снг_ст., №09-01-90716 моб_ст.

Литература

1. Проектирование автомобильных дорог: Справочник инженера-дорожника / Под ред. Г.А. Федотова. – М.: Транспорт, 1989. – 437 с.
2. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. – М.: Наука, 1980. – 352 с.
3. Шумилов Б.М., Эшаров Э.А. Нестационарные сплайн-вейвлеты в ГИС и САПР линейно-протяженных пространственных объектов // Вестник Томского государственного архитектурно-строительного университета. – 2006. – № 1 (12). – С. 153-163.

Выбор оптимальной структуры композита с использованием генетического алгоритма

Ю.В. Геренг, Ю.Н. Сидоренко

Томский государственный университет, Томск

Композиты в настоящее время широко используются в качестве конструкционных и функциональных материалов. Управление механическими свойствами этих материалов обеспечивается за счет выбора компонентов композита, параметров структуры армирования и технологии изготовления. В работе рассматривается возможность использования генетического алгоритма для оптимизации параметров структуры композита.

К числу параметров, характеризующих структуру армирования композитов относятся тип структуры (стохастическая или упорядоченная), объемное соотношение компонентов и геометрические характеристики структурных элементов (форма армирующих элементов, толщина прослоек матрицы и т.д.). Одной из основных механических характеристик композита как конструкционного материала является жесткость. Рассматрива-

ется задача выбора объемного содержания и типа структуры армирования волокнистого композита, обеспечивающих его максимальную жесткость.

Полагается, что элементы армирования (волокна) имеют одинаковый диаметр, а одноосное нагружение ведется в плоскости, нормальной к направлению армирования материала. Подобный вид нагружения для волокнистых композитов является наиболее опасным, поскольку может приводить к расслоению материала. В качестве управляемых параметров выбраны объемное содержание волокон и тип структуры армирования. Поскольку при стохастическом армировании все механические характеристики композита являются случайными величинами, критерий оптимальности записывается относительно параметров, характеризующих распределение локальных значений модуля упругости (математическое ожидание и интерквартильная широта).

Поставленная задача решается в два этапа. На первом этапе рассчитываются параметры распределения локальных значений модуля упругости для ряда наперед заданных значений объемного соотношения компонентов для обоих типов структур. По полученным данным строится простая полиномиальная (2-го порядка) модель, аппроксимирующая зависимость параметров распределения модуля упругости для всей области поиска оптимального решения.

На втором этапе построенная модель используется для нахождения оптимальных параметров структуры армирования в рамках эволюционного алгоритма. Использована простейшая реализация генетического алгоритма с единственной популяцией решений. Оценка качества всех решений в популяции выполняется одновременно в рамках параллельного алгоритма. Исследована зависимость скорости сходимости алгоритма от объема популяции.

Показано, что использованный алгоритм обеспечивает высокую скорость сходимости к оптимальному решению уже при небольшом объеме популяции решений, что свидетельствует о высокой эффективности подобных алгоритмов при решении задач оптимизации композитов.

Новый тип эрмитовых мультивейвлетов пятой степени

Д.А.Турсунов, Б.М.Шумилов, Э.А.Эшаров, Э.А.Турсунов

Ошский государственный университет, Ош, Томский государственный университет, Томск

В работе [1] при условии $\langle \psi'_1, \phi'_m(\cdot - j) \rangle = \langle \psi'_2, \phi'_m(\cdot - j) \rangle = 0$, $m=1,2$, $\forall j \in \mathbf{Z}$, построены мультивейвлеты в базисе эрмитовых кубических сплайнов. Доказано, что носителем построенных мультивейвлетов является отрезок

[0,2]. А в работе [2] при условиях $\langle \psi_1, \phi_m(\cdot-j) \rangle = \langle \psi_2, \phi_m(\cdot-j) \rangle = 0$ и $\langle \psi'_1, \phi'_m(\cdot-j) \rangle = \langle \psi'_2, \phi'_m(\cdot-j) \rangle = 0$, $m=1,2$, $\forall j \in \mathbf{Z}$, построены кубические мультивейвлеты, имеющие носитель $[-2,2]$ и $[-1,1]$ соответственно.

В данной работе для построения мультивейвлетов используются эрмитовы сплайны пятой степени. Пусть базисные сплайны ϕ_1 , ϕ_2 и ϕ_3 имеют вид:

$$\phi_1(x) = (x+1)^3(1-3x+6x^2)\chi_{[-1,0]}(x) + (1-x)^3(1+3x+6x^2)\chi_{[0,1]}(x),$$

$$\phi_2(x) = (x+1)^3(x-3x^2)\chi_{[-1,0]}(x) + (1-x)^3(x+3x^2)\chi_{[0,1]}(x),$$

$$\phi_3(x) = (x+1)^3x^2/2\chi_{[-1,0]}(x) + (1-x)^3x^2/2\chi_{[0,1]}(x),$$

где $\chi_{[a,b]}(x) = 1$ при $x \in [a,b]$, и $\chi_{[a,b]}(x) = 0$ при $x \notin [a,b]$.

Доказано, что если

$$\psi_1(x) = \phi_1(2x+1) - \phi_1(2x-1) - 60\phi_3(2x+1) - 60\phi_3(2x-1);$$

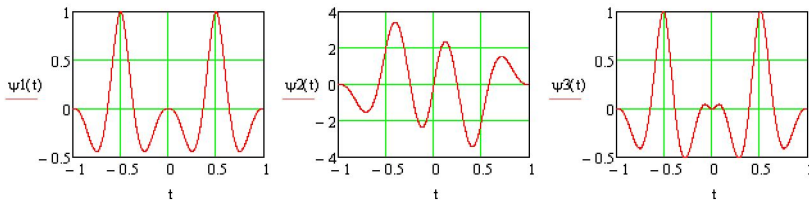
$$\psi_2(x) = 2\phi_1(2x+1) - 2\phi_1(2x-1) + 13\phi_2(2x+1) + 13\phi_2(2x-1) + 16\phi_2(2x) - 24\phi_3(2x+1) + 24\phi_3(2x-1);$$

$$\psi_3(x) = \phi_1(2x+1) + \phi_1(2x-1) - \phi_2(2x+1) + \phi_2(2x-1) - 68\phi_3(2x+1) - 68\phi_3(2x-1) + 16\phi_3(2x),$$

то выполняются условия:

$$\langle \psi''_1, \phi''_m(\cdot-j) \rangle = \langle \psi''_2, \phi''_m(\cdot-j) \rangle = \langle \psi''_3, \phi''_m(\cdot-j) \rangle = 0, \quad m=1,2,3, \quad \forall j \in \mathbf{Z}.$$

При этом носителем построенных вейвлетов является отрезок $[-1,1]$. Причем ψ_1 , ψ_3 – симметричны, а ψ_2 – антисимметричен (см. рис.).



Работа выполнена при финансовой поддержке по проектам РФФИ №09-07-90901 моб_снг_ст, № 09-01-90716 моб_ст.

Литература

1. R.-Q. Jia, S.-T. Liu. Wavelet bases of Hermite cubic splines on the interval // Adv. Comput. Math. , 2006. Vol. 25. –P. 23-39.
2. Губская М.М., Турсунов Д.А. Новые типы эрмитовых кубических сплайн-вейвлетов // Молодежная научная конференция с участием студентов, аспирантов, молодых ученых и специалистов. – Томск, ТГУ. 9-13 октября 2009 г.

Схема «предиктор – корректор» с заданными свойствами для одномерных изотермических уравнений газовой динамики

С.В. Белов, В.В. Жаровцев

НИИ прикладной математики и механики Томского государственного университета, Томск

С появлением многопроцессорных компьютеров увеличился интерес к явным разностным схемам, предназначенным для численного интегрирования уравнений в частных производных. Основной недостаток таких схем при последовательном выполнении операций – более жесткое по сравнению с неявными схемами ограничение на шаг интегрирования – в значительной мере при параллельном выполнении операций компенсируется простотой и эффективностью алгоритмов распараллеливания.

В докладе излагается подход к построению явных разностных схем одномерной изотермической газовой динамики, обладающих некоторыми наперед заданными свойствами. Строго говоря, эти свойства в полной мере присущи соответствующим линейным разностным уравнениям, но естественным образом обобщаются на нелинейные разностные схемы. Для некоторых нелинейных аналогов эти свойства были проверены на решениях тестовых задач.

Кроме аппроксимации и устойчивости на разностные уравнения и сетку накладывались дополнительные требования: минимальный сеточный шаблон, неотрицательная аппроксимация с минимальной аппроксимационной вязкостью, повышенная устойчивость. При использовании минимального сеточного шаблона формулы для расчета параметров газа в приграничных и внутренних точках разностной сетки совпадают. Схемы с неотрицательной аппроксимацией являются однородными схемами, то есть позволяют проводить расчеты течений газа с сильными и слабыми разрывами, не выделяя их. Применение операторов сглаживания повышают устойчивость разностных схем.

Исходная система дифференциальных уравнений, записанная в дивергентном виде, аппроксимируется системой разностных уравнений, у которой для каждой ячейки сетки искомые значения параметров газа на верхнем слое легко рассчитываются, если известны шаги по времени и по пространственной координате, а также значения параметров газа на нижнем слое и на боковых гранях ячейки (этап корректор). Шаг по пространственной координате задается, а шаг по времени находится из условия Куранта. Чтобы получить формулы для расчета параметров газа на боковых гранях (этап предиктор), используются соотношения, которые являются следствием исходной системы дифференциальных уравнений. Далее эти

соотношения расщепляются как по пространственной, так и по временной координате, и каждое из полученных уравнений аппроксимируется схемой Лакса со своим шагом по времени. Окончательно получается восьмипараметрическое семейство схем типа предиктор – корректор, аппроксимирующее исходную систему уравнений с первым порядком. Затем исходная система линеаризируется и симметризируется и для полученных уравнений по аналогии с нелинейным случаем записывается восьмипараметрическое семейство разностных схем. Эти разностные схемы содержат четырехпараметрическое семейство схем с неотрицательной аппроксимацией и типичными для газовой динамики условиями устойчивости, среди которых находится единственная схема с минимальной аппроксимационной вязкостью. Если к выделенной схеме применить операторы согласованного сглаживания по нижнему и верхнему слоям, то условие устойчивости можно ослабить.

Гибридный метод декомпозиции области для решения краевых задач

В.М. Свешников

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

В работах автора [1,2] были предложены прямой и итерационный методы декомпозиции для решения краевых задач на квазиструктурированных сетках, которые легко поддаются распараллеливанию и, поэтому применимы на многопроцессорных суперЭВМ. В задачах со сложной конфигурацией внешней границы Γ наиболее трудоемкой частью прямого метода может явиться вычисление разностных функций Грина в граничных подобластях, содержащих куски Γ . Кроме того, большой объем вычислений может потребовать решение системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), аппроксимирующих уравнение Пуанкаре – Стеклова на границе сопряжения подобластей.

В настоящей работе сделана попытка избавиться от этих недостатков. Пусть $G_k^{(1)}$, $G_k^{(2)}$ соответственно внутренние и граничные подобласти, на которые разбивается расчетная область G при декомпозиции, и $U^{(1)}$ – объединение внутренних подобластей, $U^{(1)} = \bigcup_k G_k^{(1)}$ ($k = \overline{1, K}$, где K – число расчетных подобластей). Решение исходной краевой задачи ищется итерационным методом декомпозиции G на подобласти $U^{(1)}$, $G_k^{(2)}$, причем решение в $U^{(1)}$ находится прямым методом. Такой подход

имеет следующие положительные свойства: 1) значительно сокращается число вспомогательных краевых подзадач по вычислению функций Грина, так как для итерационного метода они не требуются, а для прямого метода расчет функций Грина проводится только для одной подобласти, 2) уменьшается порядок матриц СЛАУ на границах сопряжения в итерационном и прямом методах, 3) на каждом шаге итерационного процесса краевые подзадачи в $U^{(1)}$ решаются лишь в подобластях, примыкающих к внутренней границе $\hat{\gamma} \subset \gamma$ между объединением $U^{(1)}$ и подобластями $G_k^{(2)}$. Предлагаемый метод излагается на примере решения уравнения Пуассона в двумерной области, но рассматривается его расширение на трехмерный случай и дифференциальные операторы более общего вида.

Литература

1. Свешников В.М. Прямой метод декомпозиции без наложения подобластей для решения краевых задач на прямоугольных квазиструктурированных сетках // Вычисл. технологии. 2008. Т.13, №2. С.106 – 118.

2. Свешников В.М. Построение прямых и итерационных методов декомпозиции // СибЖИМ. 2009. Т.12, № 3(39). С. 99 – 109.

Обоснование корректности полинейного рекуррентного метода решения разностных эллиптических уравнений

А.А.Фомин, Л.Н. Фомина

Кемеровский государственный университет, Кемерово

Как известно, решение краевых задач тепло- и массопереноса связано с разностной дискретизацией их исходных дифференциальных постановок, что в свою очередь, приводит к возникновению систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида

$$A\vec{\Phi} = \vec{f}.$$

Здесь A – матрица системы, $\vec{\Phi}$ – искомый вектор решения, \vec{f} – вектор правой части системы. Подобные системы обладают высоким порядком, а также ленточной структурой матрицы положительного типа [1]. Для многомерных задач полученные таким образом СЛАУ разрешаются, как правило, итерационными методами.

В работах [2,3] излагается алгоритм и рассматриваются результаты тестовых расчетов итерационного полинейного рекуррентного метода. Данный метод демонстрирует свою высокую эффективность. При этом в силу того, что в общем случае записать его явно в канонической форме как пер-

вого $P_{k+1}(\bar{\Phi}^{k+1} - \bar{\Phi}^k) = \bar{f} - A\bar{\Phi}^k$, так и второго вида $\bar{\Phi}^{k+1} = T_k \bar{\Phi}^k + \bar{g}_k$ [1], не представляется возможным, корректность каждого расчета необходимо фактически доказывать вычислением нормы невязки для очередного приближения решения. Само по себе выполнить такое вычисление не сложно, более того, именно по величине нормы невязки и определяется сходимость вектора решения. Однако в целях теоретической завершенности изложения этого метода представляется необходимым в общем случае обосновать его корректность, то есть показать, что в случае выполнения условия $\|\bar{\Phi}^{k+1} - \bar{\Phi}^k\|_{k \rightarrow \infty} \rightarrow 0$, полученное решение удовлетворяет исходной системе (1).

На основании проведенных исследований показано, что алгоритм метода путем пошаговых устойчивых преобразований переводит исходную систему уравнений к виду

$$W(\bar{\Phi}^{k+1} - \bar{\Phi}^k) = R(A\bar{\Phi}^k - \bar{f}),$$

где $W = W(\theta)$ – удобно разрешаемый оператор с четырехдиагональной почти верхнетреугольной матрицей, R – оператор невырожденных эквивалентных преобразований, а θ – итерационный параметр компенсации. При этом матрицы операторов W и R выписываются явным образом. Нетрудно видеть, что в этом случае вопрос о корректности метода решается естественным образом.

Литература

1. Ильин В.П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Физматлит. 1995.
2. Фомин А.А. Фомина Л.Н. Полинейный рекуррентный метод решения СЛАУ с пятидиагональной матрицей // Четвертая Сибирская школа-семинар по параллельным и высокопроизводительным вычислениям (Томск, 9-11 октября 2007 г.). Томск: Дельтаплан. 2008.
3. Фомина Л.Н. Использование полинейного рекуррентного метода с переменным параметром компенсации для решения разностных эллиптических уравнений // Вычислительные технологии. ИВТ СО РАН. 2009. т. 14. № 4. С. 108-120.

Численный метод расчета явления термического бара в озере Байкал

Б.О. Цыденов

Томский государственный университет, Томск

Термический бар (термобар) представляет собой узкую зону в глубоком озере умеренных широт, в которой происходит погружение имею-

щей наибольшую плотность воды от поверхности до дна. Термобар препятствует обмену водных масс между прибрежными и центральным районами озера, являясь в то же время зоной конвергенции этих масс, т.е. гидрологическим фронтом. Важность изучения термобара как явления, которое может оказать существенное влияние на процессы распространения загрязнения, состоит в том, что интенсивные нисходящие течения, возникающие между двумя конвективными ячейками, могут привести к быстрому распространению загрязнения из поверхностных слоев до очень больших глубин.

Целью данной работы является численное моделирование конвективных течений для исследования явления термического бара в озере Байкал. В основу исследования положена двумерная негидростатическая модель в приближении Буссинеска для конвективного течения:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_0} \cdot \frac{\partial \tilde{p}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{T - T_0}{T_0} g;$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial u}{\partial y} \right);$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial uT}{\partial x} + \frac{\partial vT}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} (D_x \frac{\partial T}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_y \frac{\partial T}{\partial y});$$

где u , v – составляющие скорости по осям x и y , T – температура, ρ_0 – характерная плотность воды, p – давление, коэффициенты K_x , K_y и D_x , D_y характеризуют интенсивность диффузионного переноса импульса и тепла в соответствующем направлении; $\tilde{p} = p - \rho_0 g y$.

В численных расчетах сделана попытка воспроизвести реальные условия озера. Путем блокировки некоторых контрольных объемов прямоугольной неравномерной сетки [1] расчетную область приблизили к прибрежному профилю озера Байкал, взятому из работы [2]. Протяженность расчетной области $L_x = 10$ км, а глубина $H = 900$ м примерно соответствует средним глубинам южного бассейна Байкала. Численный алгоритм нахождения поля течения основан на разностной схеме Кранка–Никольсона [3]. Конвективные слагаемые в уравнениях аппроксимируются по противопотоковой схеме Upwind. Решение конвективно-диффузионного уравнения основано на конечно-разностном методе контрольного объема. Для расчета поля течения использована процедура SIMPLE [1]. Алгебраические системы решаются методом нижней релаксации и явным методом Булеева [4].

Программа была протестирована для случая квадратной каверны с использованием результатов исследований В.И. Полежаева [5].

Исследования показали, что физическая картина явления термического бара состоит в том, что в период весеннего прогрева

формируются крупномасштабные вертикальные циркуляции, достигающие придонных областей.

Литература

1. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 96–98 с., 84–90 с.
2. Shimaraev M.N., Verbovolov V. I., Granin N.G., Sherstyankin P.P. Physical Limnology of Lake Baikal: a Review. Irkutsk Okayama, 1994.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989. – 257–279 с.
4. Ильин В.П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. – М.: Физматлит, 1995. – 288 с.
5. Полежаев В.И., Бунэ А.В., Врезуб Н.А. и др. Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье–Стокса – М.: Наука, 1987. – 26–31 с.

Приближенное решение дифференциальных уравнений четвертого порядка вейвлет-методом Галеркина

Д.А. Турсунов, Э.А. Эшаров, А.Т. Бекмуратов

Ошский государственный университет, Ош, Томский государственный университет, Томск

В данной работе используются эрмитовы сплайн-вейвлеты пятой степени. Базисные сплайны ϕ_1 , ϕ_2 и ϕ_3 имеют вид: $\phi_1(x)=(x+1)^3(1-3x+6x^2)\chi_{[-1,0]}(x)+(1-x)^3(1+3x+6x^2)\chi_{[0,1]}(x)$,

$$\phi_2(x)=(x+1)^3(x-3x^2)\chi_{[-1,0]}(x)+(1-x)^3(x+3x^2)\chi_{[0,1]}(x),$$

$$\phi_3(x)=(x+1)^3x^2/2\chi_{[-1,0]}(x)+(1-x)^3x^2/2\chi_{[0,1]}(x),$$

где $\chi_{[a,b]}(x)=1$, при $x \in [a,b]$ и $\chi_{[a,b]}(x)=0$, при $x \notin [a,b]$.

А материнские вейвлеты имеют вид: $\psi_1(x)=\phi_1(2x+1)-\phi_1(2x-1)-60\phi_3(2x+1)-60\phi_3(2x-1)$,

$$\psi_2(x)=2\phi_1(2x+1)-2\phi_1(2x-1)+13\phi_2(2x+1)+13\phi_2(2x-1)+16\phi_2(2x)-24\phi_3(2x+1)+24\phi_3(2x-1),$$

$$\psi_3(x)=\phi_1(2x+1)+\phi_1(2x-1)-\phi_2(2x+1)+\phi_2(2x-1)-68\phi_3(2x+1)-68\phi_3(2x-1)+16\phi_3(2x).$$

В отличие от классических полуортогональных вейвлетов Чуи и Вонга, эти вейвлеты ортогональны со скалярным произведением $\langle u'', v'' \rangle$, а не $\langle u, v \rangle$ [1]. Это требование ортогональности лучше подходит для применения вейвлетов к численному решению дифференциальных уравнений четвертого порядка. Вдобавок, построенные с использованием данного подхода вейвлеты имеют меньший носитель. А в работе [2] рассмотрена задача Дирихле для дифференциальных уравнений второго порядка. Использовано

этот же метод, но сплайн-вейвлеты построены в базисе эрмитовых кубических сплайнов.

Нетрудно заметить, что множество

$$\Phi_n := \{\phi_1(2^n \cdot -j): j=1, \dots, 2^n-1\} \cup \{\phi_2(2^n \cdot -j): j=1, \dots, 2^n-1\} \cup \{\phi_3(2^n \cdot -j)\}_{(0,1)}: \\ j=0, \dots, 2^n\},$$

является базисом для V_n . Ψ_n множество вейвлетов вида:

$$\Psi_n := \{\psi_1(2^n \cdot -j): j=1, \dots, 2^n-1\} \cup \{\psi_2(2^n \cdot -j): j=1, \dots, 2^n-1\} \cup \{\psi_3(2^n \cdot -j)\}_{(0,1)}: \\ j=0, \dots, 2^n\},$$

и W_n – линейное пространство, натянутое на Ψ_n . Доказана

Теорема. $\int_0^1 w'v''(x)v''(x)dx = 0, \forall w \in \Psi_n, \forall v \in \Phi_n$. Из этого следу-

ет, что $V_n \cap W_n = \{0\}$. Кроме того, $V_{n+1} \supseteq V_n + W_n$ и $\dim(V_{n+1}) = \dim(V_n) + \dim(W_n)$. Это означает, что $V_{n+1} = V_n \oplus W_n$. Следовательно, мы получили искомого разложение $H_0^1(0,1): H_0^1(0,1) = V_1 \oplus W_1 \oplus W_2 \oplus \dots$, где $H_0^1(0,1)$ – замыкание множества $\{u \in C[0,1] \cap C'[0,1] \cap C''[0,1]: u(0)=u(1)=u'(0)=u'(1)=0\}$ в $H^1(0,1)$; $H^1(0,1)$ – пространство функции $u(x) \in C(0,1)$ таких, что $u''(x) \in L_2(0,1)$.

Работа выполнена при финансовой поддержке по проектам РФФИ №09-07-90901 моб_снг_ст, № 09-01-90716 моб_ст.

Литература

1. С.К. Chui and J.Z. Wang. On compactly supported wavelets and a duality principle, Trans. Amer. Math. Soc. 1992. Vol. 330. –P. 903-916.
2. Д.А.Турсунов, Э.А.Эшаров, Численное решение дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений с помощью эрмитовых кубических сплайн-вейвлетов // Молодежная научная конференция с участием студентов, аспирантов, молодых ученых и специалистов. - Томск. ТГУ. 9-13 октября 2009 г.

Кластеризация в анализе движения в изображении с неподвижной камеры

А.И. Шапошников

Томский институт академии ВЭГУ, Томсклаб, Томск

Задача анализа изображения неподвижной камеры вызвана большим числом прикладных задач– например, слежения, управления движением и др. В качестве основных этапов этом анализе выделяются фильтрация изображения, выделение движущихся объектов и слежение за выделенными объектами– трекинг (tracking) [1,2,6]. Несмотря на значительные продвижения в каждой из этих задач в отдельности (удаление теней и бли-

ков [3], выделение движущегося множества [5], трекинг выделенных объектов [7–9], анализ группы вращений и т.д.), задача анализа движений объектов произвольного ролика (например, из [4]) еще не решена. Как отмечено в [2] "практическое использование вычислительной техники ограничено, и исследования должны продолжаться".

В этой работе предложена новая техника кластеризации видеоизображений, основанная на MeanShift-кластеризации [8,9], приводящая к идентификации элементов в видеоряде, и обсуждены результаты ее применения. При проведении такой схемы кластеризации в один кластер оказываются отнесенными пиксели, принадлежащие одному объекту, но находящиеся в разных кадрах. Это позволяет находить движущийся объект на последовательных кадрах.

В работе также обсуждены условия, при которых можно осуществить, предложенную схему кластеризации.

Литература

1. Cucchiara R., Grana C., Piccardi M., and Prati A. Detecting moving objects, ghosts, and shadows in video streams // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 25(10):1337–1342.
2. Xiao M., Zhao C., Zhang H.L. Moving Shadow Detection and Removal for Traffic Sequences // International Journal of Automation and Computing, 04(1), January 2007, 38–46.
3. Stauder J., Meeh R., and Ostermann J. Detection of moving cast shadows for object segmentation // IEEE Transactions on Multimedia, 1(1):65–76, 1999.
4. YouTube.com.
5. Гаганов В., Конушин А. Сегментация движущихся объектов в видеопотоке. <http://cgm.computergraphics.ru/content/view/67>.
6. Comaniciu D., Ramesh V., and P. Meer P. Real-time tracking of non-rigid objects using mean shift // Proc. IEEE Conf. on Computer Vision and Pattern Recognition, Hilton Head, SC, volume II, June 2000. P. 142–149.
7. Tuzel O., Porikli F., Meer P. Learning on Lie Groups for Invariant Detection and Tracking // IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), June 2008 (IEEE Xplore, TR2008-031).
8. Fukunaga K., Hostetler L. D. The estimation of the gradient of a density function, with applications in pattern recognition // IEEE, Trans. Information Theory. Vol.3653. P. 1210–1221, 1999.
9. Comaniciu D., Meer P. [Mean Shift Analysis and Applications](#) // IEEE Int. Conf. Computer Vision (ICCV'99), Kerkyra, Greece, 1197–1203, 1999.

Исследование неоднородной структуры биологического объекта при пропускании электрического тока небольшой силы

Е.С. Шерина

Томский государственный университет, Томск

Для исследования структуры неоднородности в объектах различной природы используется томография. Область применения томографии охватывает медицинскую диагностику, геофизику, промышленную интроскопию и т. д. В медицине томографические обследования позволяют получить данные об анатомической структуре и функционировании органов и систем организма, помогают выявлять аномалии в участках органов и тканях. В современной диагностике живых организмов особый интерес представляет визуализирующая диагностика, позволяющая воспроизводить внутреннюю структуру биологических объектов. Данная работа связана с одним из методов медицинской визуализации - электроимпедансной томографией (ЭИТ). Исследования ЭИТ осуществляются с использованием электрического тока в качестве зондирующего агента. С физической точки зрения диагностические системы воспроизводят (с некоторой погрешностью) распределение в пространстве какой-либо физической величины, например электрической проводимости.

Цель данной работы - реконструкция изображения ЭИТ, состоящая из двух основных этапов: решение прямой и обратной задач. Первоначально необходимо решить прямую задачу ЭИТ, заключающуюся в нахождении распределения потенциала электрического поля внутри биологического объекта при заданном распределении коэффициента проводимости и конфигурации поверхностных источников тока. Решение обратной задачи приводит к восстановлению неизвестного коэффициента распределения проводимости внутри исследуемого объекта по данным измерения разности потенциалов между точками его поверхности.

Для решения задачи в рассматриваемой области построена неструктурированная сетка с помощью сеточного генератора GAMBIT. Аппроксимация дифференциальной задачи осуществлена на основе метода конечного объема (МКО) на неструктурированной треугольной сетке. Системы разностных уравнений решались с использованием стабилизированного метода бисопряженных градиентов Bi-CGSTAB.

Для реализации модели биологического объекта использовалось объектно-ориентированное программирование. Модель состоит из точек (узлов ячеек), которые соединены линиями и образуют конечные элементы (треугольные ячейки). С помощью встроенных в объект процедур и функций находились основные параметры каждой ячейки (центр масс, пло-

щадь, длины граней) и вычислялись коэффициенты разностного уравнения для данной ячейки.

В результате работы решены прямая и обратная задачи ЭИТ для модели биологического объекта с неоднородной структурой. Исследованы вопросы аппроксимации, сходимости и устойчивости разностной схемы построенной МКО.

Литература

1. Пеккер Я.С., Бразовский К.С. Электроимпедансная томография. – Томск: Изд-во НТЛ, 2004. – 192 с.

2. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 480 с.

Численное исследование процессов, протекающих в проточной части вентилятора

Е.И. Гурина

Томский электромеханический завод им. Вахрушева, Томский государственный университет, Томск

В работе проводится математическое моделирование физических процессов, протекающих в проточной части осевого вентилятора с помощью пакета газовой динамики Fluent. Показана возможность использования математического моделирования для виртуальных (находящихся на стадии разработки) моделей вентиляторов, которые далее воплощаются в реальные объекты. Представлено сопоставление экспериментальных данных с данными численного моделирования.

Для моделирования работы устройства необходимо математически описать протекающие при этом физические процессы, решить полученную математическую задачу (численным методом) и провести анализ полученных результатов. В данной работе этот процесс проводится на примере шахтного вентилятора встречного вращения с помощью программного комплекса Fluent. В задаче требуется найти перепад полного давления и объемный расход воздуха, который ему соответствует на выбранном режиме работы вентилятора.

Математическая модель, описывающая течение потока воздуха в проточной части вентилятора представляется системой дифференциальных уравнений, которая включает в себя [1,2] уравнения движения Навье-Стокса, уравнение неразрывности и уравнения модели турбулентности. Для данной задачи использовалась стандартная $k - \epsilon$ модель турбулентности [3], базирующаяся на уравнениях переноса турбулентной кинетической энергии k и скорости диссипации ϵ . При сжимаемой рабочей среде

к системе уравнений Навье - Стокса дополнительно подключают уравнение энергии и уравнение состояния. Если же плотность воздуха принята в расчетах постоянной, а рассчитывать температурное поле нет необходимости, то последние два уравнения можно исключить.

Основной способ решения инженерных задач, связанных с движением вязкой жидкости, заключается в использовании численных методов [4]. Наиболее популярным из методов дискретизации при решении задач вычислительной гидрогазодинамики является метод конечного объема. Для описания поля течения, проточная часть вентилятора разбивается на конечный набор контрольных объемов, составляющих конечно-разностную сетку модели.

Для анализа течения полученные результаты расчета представляются в виде интегральных характеристик, а также полей скоростей и давлений в радиальных сечениях модели. Данный расчет проводился по известному заранее граничному условию на выходе из вентилятора. В качестве расчетных параметров выступали объемный расход воздуха и значение полного давления.

Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными, с учетом того, что расчет проводился на не детализированной, а упрощенной геометрии вентилятора. Так, расхождение в значениях параметров составило: для полного давления в пределах 0 – 4 %; для расхода воздуха 4 – 6 %.

Литература

1. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: ИЛ, 1956. 515 с.
2. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. М.: Дрофа, 2003. 840 с.
3. Рейнольдс У. К., Себеси Т. Расчет турбулентных течений. М.: Машиностроение, 1980. 343 с.
4. FLUENT. User's Guide. 2008.

Генетический алгоритм распределения параллельных задач с нефиксированными параметрами по машинам распределенной вычислительной системы

С. Н. Мамойленко, А. В. Ефимов

Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, Новосибирск

Распределенные вычислительные системы (ВС) являются основой современной индустрии высокопроизводительной обработки информации. Все основные ресурсы распределённых ВС являются логически и технически рассредоточенными. Элементарная машина (ЭМ) является основным

функциональным и структурным элементом ВС, её конфигурация допускает варьирование от процессорного ядра до ЭВМ. Количество ЭМ, в распределенной ВС варьируется от десятка до сотен тысяч [1].

Эффективность функционирования ВС зависит от того, как организовано использование её ресурсов. Перспективной считается технология параллельного мультипрограммирования [1], согласно которой все ресурсы системы разделяются между несколькими одновременно выполняющимися параллельными программами.

Одной из актуальных задач организации функционирования распределенных ВС является задача построения расписаний решения пользовательских задач, представленных параллельными программами.

В общем случае задача составления расписания является NP-полной [2]. Актуальной является разработка приближенных алгоритмов решения данной задачи.

Большинство параллельных задач, решаемых с использованием распределенных ВС, обладают свойством адаптивности (moldability) [3], способностью решаться на подсистемах различного ранга, т. е. параметры ранг и время требуемой подсистемы нефиксированные. Под рангом понимается количество ЭМ распределенной ВС.

В докладе рассматривается разработанный генетический алгоритм (ГА) построения расписаний выполнения параллельных программ с нефиксированными параметрами на распределенных ВС. Варианты ресурсов, требуемых для решения параллельной задачи, задаются в виде вектора значений с приоритетами. Начальные расписания (популяция) строятся распределением задач набора по пакетам, с применением алгоритмов упаковки в контейнеры (Best-Fit, First-Fit)[4]. Каждый пакет объединяет несколько задач (генов), решаемых на ВС параллельно. В качестве кроссовера используется алгоритм перетасовки генов [5]. Мутация заключается в изменении параметров в случайно выбранных задачах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 09-07-90403, 09-07-13534, 09-07-00095, 08-07-00022).

Литература

1. Хорошевский, В. Г. Архитектура вычислительных систем / В. Г. Хорошевский. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. – 520 с.
2. Коффман, Э. Г. Теория расписаний и вычислительные машины / Э. Г. Коффман. – М.: Наука, 1984. – 336 с.
3. Cirne, W. A Model for Moldable Supercomputer Jobs / Walfredo Cirne, Francine Berman // 15th Intl. Parallel & Distributed Processing Symposium. April 2001.
4. Гэри, М. Вычислительные машины и труднорешаемые задачи / М. Гэри, Д. Джонсон. - М.: Мир, 1982. – 416 с.

5. Rohlfschagen P. A genetic algorithm with exon shuffling crossover for hard bin packing problems / Philipp Rohlfschagen, John A. Bullnaria // Proceedings of the 9th annual conference on Genetic and evolutionary computation. - ACM New York, USA, 2007. -P.1365 – 1371.

Алгоритмы коллективных информационных обменов для иерархических распределенных вычислительных систем

М.Г. Курносов

Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск

Параллельные алгоритмы и программы для распределенных вычислительных систем (ВС) преимущественно разрабатываются в модели передачи сообщений (message passing), в соответствии с которой ветви программы синхронизируют свою работу по средствам информационных обменов по каналам межмашинных связей. В рамках данной модели широкое распространение получили коллективные операции информационных обменов [1]: трансляционная передача данных из одной ветви программы в остальные (one-to-all), передача данных из каждой ветви всем (all-to-all), коллекторный прием данных от всех ветвей в одной (all-to-one). Коллективные операции реализуются на основе дифференцированных обменов (point-to-point), при которых осуществляется передача данных из одной ветви в любую другую.

В существующих коммуникационных библиотеках (MPICH2, OpenMPI, PVM и др.) для реализации передачи данных из каждой ветви всем используются алгоритмы рассылки данных по кольцу, рекурсивное сдвигание (recursive doubling) и алгоритм Брука (Bruck), трансляционные передачи реализуются преимущественно путем упорядочивания процессов в биномиальное дерево, по которому распространяются сообщения [2]. Перечисленные алгоритмы опираются на предположение об однородности каналов связи между элементарными машинами распределенных ВС, однако для современных систем характерны иерархическая организация и различные пропускные способности каналов связи между их ресурсами (вычислительными узлами, процессорами и их ядрами) [3]. Перспективным является создание моделей и алгоритмов коллективных информационных обменов, учитывающих структурные особенности распределенных ВС.

В Лаборатории вычислительных систем Института физики полупроводников СО РАН совместно с Центром параллельных вычислительных технологий ГОУ ВПО “Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики” созданы математические модели и алго-

ритмы коллективных информационных обменов, учитывающие иерархическую организацию современных ВС.

В докладе приводятся описание предложенных алгоритмов реализации передачи данных из каждой ветви всем (all-to-all) и разрабатываемая библиотека оптимизированных функций коллективных информационных обменов ToroMPI.

Результаты натуральных экспериментов на действующем вычислительном кластере показали превосходство созданных алгоритмов по времени реализации коллективных операций в 2 – 5 раз (в зависимости от размера передаваемого сообщения) по сравнению с алгоритмами библиотек MPICH2 и OpenMPI.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 08-07-00018, 09-07-13534, 09-07-12016) и Совета по грантам Президента РФ (грант № НШ-2121.2008.9).

Литература

1. Хорошевский В. Г. Архитектура вычислительных систем. – М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2008. – 520 с.
2. Thakur R., Rabenseifner R. and Gropp W. Optimization of Collective Communication Operations in MPICH // Journal of High Performance Computing Applications. – 2005. – Vol. 19(1). – P. 49-66.
3. Khoroshevsky V., Kurnosov M. Mapping Parallel Programs into Hierarchical Distributed Computer Systems // Proc. of Int. Conference “Software and Data Technologies”, 2009. – Vol. 2. – P. 123-128.

Система обеспечения виртуального рабочего пространства для проведения численных экспериментов на распределенных вычислительных комплексах

Н.Н. Окулов

Кемеровский государственный университет, Кемерово

Многие организации, а особенно университеты, имеют несколько компьютерных классов, на базе каждого из которых легко может быть организован однородный кластер. Так, например, в ЦНИТ КемГУ организован распределенный вычислительный ресурс на базе уже существующих учебных компьютерных классов, включенный в единую университетскую сеть.

При поддержке аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы (2006-2008 годы)» в КемГУ был создан информационно-вычислительный портал (ИВП), являющийся единым информационным пространством для организации учебной

и научной деятельности ВУЗа в сфере решения различных задач с использованием вычислительного эксперимента, проведения научных конференций, хранения и работы с информационными ресурсами, неформального общения в тематических форумах и др. Одной из подсистем ИВП является система для обеспечения виртуального рабочего пространства для проведения численных экспериментов и лабораторного практикума в рамках курсов по высокопроизводительным вычислениям с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов в удаленном режиме («Виртуальная лаборатория»).

«Виртуальная лаборатория» строится на основе технологий, используемых информационно-вычислительным порталом КемГУ, а именно: СУБД Oracle, сервера приложений Tomcat и пакета KemsuWeb. Доступ к системе осуществляется посредством web-браузера.

Основным пользовательским объектом в системе является лабораторная работа, которая содержит набор входных параметров работы и список проектов. Поддержка создания нескольких проектов в рамках лабораторной работы необходима для обеспечения возможности запуска на кластерах различной конфигурации (имеют значение вычислительная архитектура кластера, операционная система, используемые компиляторы). Значения входных параметров работы (например, количество итераций или размерность матрицы) можно варьировать при запуске лабораторной работы.

В данное время происходит наполнение базы виртуальных практикумов лабораторными заданиями разной тематики. Также в систему планируется включить разработанную в КемГУ библиотеку параллельных программ HydroParaLib, предназначенную для решения задач гидродинамики. В дальнейшем планируется интеграция в систему библиотек параллельных программ различной направленности.

Создание информационной системы поддержки учебного процесса с возможностью проведения виртуальных практикумов является актуальной задачей информационного обеспечения учебно-научного процесса. Данная система может использоваться в качестве средства для анализа зависимости ускорения, эффективности параллельной программы от значений различных параметров задачи, что актуально как для учебных, так и для научных целей. Благодаря интеграции в информационно-вычислительный портал КемГУ, доступ к разрабатываемой системе может получить любой пользователь сети интернет.

Расчет показателей эффективности функционирования распределенных вычислительных систем при решении задач потока с отказами

В.А. Павский, К.В. Павский

Кемеровский технологический институт, Кемерово,
Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск

На вычислительную систему (ВС) [1] поступает пуассоновский поток простых (последовательных) задач с интенсивностью α , из которых формируется пакет. Количество задач в пакете ограничивается числом n элементарных машин ВС, выделяемых для решения поступающих задач. Если пакет сформирован, то очередная задача получает отказ и считается потерянной. Как только ВС освобождается, она приступает к обслуживанию пакета (пусть даже и не до конца сформированного) и начинается формирование очередного пакета. Время решения каждой задачи в системе является случайной величиной, распределенной по экспоненциальному закону с интенсивностью решения β . По окончании решения всех задач ВС переходит к решению задач из очередного пакета. Требуется проанализировать эффективность работы системы.

Обозначим через $P_k(t)$ - вероятность того, что в момент времени $t \in [0, \infty)$ пакет состоит из k нерешенных задач, причем $P_0(0) = 1$ (т.е. в начальный момент времени пакет был пустым); $k \in E_0^n = \{0, 1, \dots, n\}$.

Используя методы ТМО [2,3], получаем систему дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} P_0(t) = -\alpha \cdot P_0(t) + \beta \cdot \sum_{k=1}^n P_k(t), \\ \frac{d}{dt} P_k(t) = -(\alpha + \beta) \cdot P_k(t) + \alpha \cdot P_{k-1}(t), \quad k \in E_1^{n-1}, \\ \frac{d}{dt} P_n(t) = -\beta \cdot P_n(t) + \alpha \cdot P_{n-1}(t), \end{cases} \quad (1)$$

с начальными условиями и условием нормировки:

$$P_0(0) = 1, \quad P_k(0) = 0, \quad k \in E_0^n = \{0, 1, \dots, n\}, \quad \sum_{k=0}^n P_k(t) = 1, \quad \forall t \in [0, \infty). \quad (2)$$

Общее решение системы (1) с учетом (2) записывается в виде:

$$P_0(t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta} + \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \cdot e^{-(\alpha + \beta)t},$$

$$P_k(t) = \frac{\alpha^k \cdot \beta}{(\alpha + \beta)^{k+1}} - \frac{\alpha^k \cdot \beta}{(\alpha + \beta)^{k+1}} \cdot e^{-(\alpha + \beta)t} +$$

$$e^{-(\alpha + \beta)t} \cdot \left(\frac{\alpha^{k+1} \cdot t^k}{k! \cdot (\alpha + \beta)} - \alpha^k \cdot \beta \cdot \sum_{r=1}^{k-1} \frac{t^r}{r! \cdot (\alpha + \beta)^{k-r+1}} \right) +$$

$$+ e^{-(\alpha + \beta)t} \cdot \left(\frac{\alpha^{k+1} \cdot t^k}{k! \cdot (\alpha + \beta)} - \alpha^k \cdot \beta \cdot \sum_{r=1}^{k-1} \frac{t^r}{r! \cdot (\alpha + \beta)^{k-r+1}} \right),$$

$$P_n(t) = \frac{\alpha^n}{(\alpha + \beta)^n} + \frac{\alpha^{n-1} \cdot \beta}{(\alpha + \beta)^n} \cdot e^{-(\alpha + \beta)t} -$$

$$\frac{\alpha^n}{(n-1)! \cdot (\alpha + \beta)} \cdot e^{-(\alpha + \beta)t} \cdot \left(t^{n-1} + (n-1)! \cdot \sum_{k=1}^{n-1} \frac{t^{n-k-1}}{\alpha^k \cdot (n-k-1)!} \right) +$$

$$+ \alpha^{n-1} \cdot \beta \cdot e^{-(\alpha + \beta)t} \cdot \sum_{r=1}^{n-2} \frac{t^r}{r! \cdot (\alpha + \beta)^{n-r}} +$$

$$\alpha^{n-1} \cdot \beta \cdot e^{-(\alpha + \beta)t} \cdot \sum_{r=1}^{n-2} \sum_{k=1}^r \frac{t^{r-k}}{\alpha^k \cdot (\alpha + \beta)^{n-r} \cdot (r-k)!}.$$

Построенная модель также позволяет получить:

- 1) вероятность того, что пакет не пуст $P_{\geq 1} = 1 - P_0$;
- 2) вероятность отказа в обслуживании задачи $P_{ОТК} = P_n$;
- 3) средний объем пакета $n = \left[\frac{\ln P_{ОТК}}{\ln \alpha - \ln(\alpha + \beta)} \right]$, где $[x]$ - целая часть

числа x ;

- 4) среднее число задач в пакете

$$M = \frac{\alpha \cdot \beta}{(\alpha + \beta)^2} \cdot \sum_{k=1}^{n-1} k \cdot \frac{\alpha^{k-1}}{(\alpha + \beta)^{k-1}} + n \cdot \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta} \right)^n;$$

- 5) дисперсию числа задач в пакете

$$D = \frac{\alpha \cdot \beta}{(\alpha + \beta)^2} \cdot \sum_{k=1}^{n-1} k^2 \cdot \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta} \right)^{k-1} + n^2 \cdot \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta} \right)^n - M^2.$$

Литература

1. Хорошевский В.Г. Архитектура вычислительных систем. М.: МГТУ им. Баумана, 2005. 512 с.
2. Клейнрок Л. Теория массового обслуживания. М.: Машиностроение, 1979. 432 с.
3. Вишнеvский В.М. Теоретические основы проектирования компьютерных сетей. М.: Техносфера, 2003. – 512 с.

Децентрализованная диспетчеризация параллельных программ в распределенных вычислительных системах

А.А. Пазников

Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, Новосибирск

Для решения сложных задач науки и техники широкое распространение получили пространственно-распределенные вычислительные системы (ВС). Они представляют собой макроколлективы рассредоточенных ВС (вычислительных подсистем), взаимодействующих через локальные и глобальные сети связи [1]. К таким системам относятся GRID-системы и мультикластерные ВС.

При организации функционирования распределенных ВС возникает задача диспетчеризации параллельных программ, поступающих в систему. Для каждой программы необходимо определить, на каких вычислительных ресурсах каких подсистем она будет выполняться. В средствах диспетчеризации должны учитываться динамичность состава систем и переменная загрузка их вычислительных ресурсов.

Существующие программные средства диспетчеризации (GridWay, CSF, Nimrod/G, Condor-G, GrADS, AppLeS) являются централизованными [2]: в них отказ управляющего узла может привести к неработоспособности всей ВС.

При децентрализованной схеме диспетчеризации задач в системе функционирует коллектив диспетчеров, принимающий решение о выделении ресурсов для программ. Это позволяет достичь живучести ВС, то есть ее способности продолжать работу при отказах отдельных вычислительных подсистем.

В Центре параллельных вычислительных технологий ГОУ ВПО “Сибирского государственного университета телекоммуникаций и информатики” (ЦПВТ ГОУ ВПО “СибГУТИ”) ведется разработка программного пакета GBroker децентрализованной диспетчеризации программ в распределенных ВС (в том числе, GRID-системах и мультикластерных ВС). В

пакет входят диспетчер `gbroker`, клиентское приложение `gclient` и средство мониторинга `netmon` производительности каналов связи.

Модуль `gbroker` устанавливается на каждой из подсистем и обеспечивает на основе расширяемой архитектуры интерфейс с системой пакетной обработки заданий (например, `TORQUE`). Модуль `netmon` устанавливается вместе с `gbroker` на подсистемах. Модуль `gclient` реализует интерфейс между пользователем и системой.

Пользователь формирует задание, состоящее из параллельной MPI-программы и паспорта на языке ресурсных запросов `JSDL`, и отправляет его средствами `gclient` любому из диспетчеров `gbroker`. Диспетчер в соответствии с реализованными в нем алгоритмами выделяет подсистему элементарных машин (возможно с другой подсистемы), на которой затем решается задача.

В докладе рассматривается разработанный децентрализованный алгоритм диспетчеризации параллельных программ в распределенных ВС, приводятся результаты натурных экспериментов на мультикластерной ВС ЦИВТ ГОУ ВПО «СибГУТИ».

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 08-07-00018) и Совета по грантам Президента РФ (грант № НШ-2121.2008.9).

Литература

1. Хорошевский В. Г. Архитектура вычислительных систем. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. – 520 с.
2. Gaweda I., Wilk C. Grid Brokers and Metaschedulers. Market Overview // Technical Report. – Kraków, 2006.

Реализация распределённой runtime-системы исполнения фрагментированных программ

Е.Б. Перегудов, В.А. Перепелкин

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Работа посвящена разработке и реализации распределенной runtime-системы исполнения фрагментированных программ, использующей диспетчеризацию памяти.

Фрагментированное программирование – это технология параллельного программирования, реализующая сборочный подход и ориентированная на задачи численного моделирования. В этой технологии параллельная программа представлена множеством фрагментов вычислений, фрагментов данных и управлением, задающим способ исполнения про-

граммы. Фрагмент задает вычислительный процесс над определенными данными. Исполнение программы состоит в запуске исполнительной системой вычислительных фрагментов на параллельном компьютере в соответствии с заданным управлением. Помимо вышеперечисленного задается дополнительное управление, ограничивающее допустимый порядок исполнения фрагментов, и рекомендации по частичному отображению программы на ресурсы. Эта информация используется исполнительной системой для эффективного исполнения программы.

В задачи, решаемые исполнительной системой, входят управление запуском и распределением фрагментов, распределение и пересылка данных, координация фрагментов и данных, настройка на имеющееся аппаратное обеспечение и динамическая балансировка загрузки. Программист освобождается от программирования этих системных составляющих, связанных с управлением ходом вычислений, в частности, распределением ресурсов вычислительной системы и пересылкой данных. Эффективная параллельная программа получается автоматически на основе высокоуровневого описания.

Разработана исполнительная система для фрагментированных программ, ориентированная на параллельные компьютеры с распределенной памятью и удовлетворяющая следующим требованиям: масштабируемость по числу процессорных элементов, поддержка гибридных систем (мультимикропроцессоров с узлами-микропроцессорами), обеспечение динамической балансировки загрузки вычислительных узлов, реализация коммуникаций параллельно с вычислениями и настройка на имеющееся аппаратное обеспечение. Реализован и протестирован на ряде задач численного моделирования прототип разработанной исполнительной системы.

Автоматическое обеспечение динамической балансировки загрузки в технологии фрагментированного программирования

В.К. Гранкин, В.А. Перепелкин, А.В. Тальников

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Работа посвящена проблеме автоматического обеспечения динамической балансировки загрузки процессоров при исполнении параллельной программы в технологии фрагментированного программирования.

Подход фрагментированного программирования ориентирован на большие численные модели и состоит в том, чтобы представить алгоритм в специальном фрагментированном виде и снабдить дополнительной информацией о структуре программы и рекомендуемом способе исполнения.

Благодаря этой информации возможно автоматическое обеспечение динамических свойств выполнения программы для задач численного моделирования. К таким свойствам относятся динамическая балансировка загрузки, настройка на аппаратные ресурсы, обеспечение коммуникаций на фоне вычислений.

В работе предложен алгоритм динамической балансировки загрузки. В этом алгоритме структура программы задается графом, вершинами которого являются фрагменты, а весовыми ребрами – связи между фрагментами. Этот граф распределяется по процессорным элементам. При необходимости перебалансировки фрагменты для миграции выбираются таким образом, чтобы максимизировать число соседних фрагментов в том же процессорном элементе, и минимизировать число соседних фрагментов в других процессорных элементах. Предложенный алгоритм позволяет уменьшать накладные расходы на коммуникации, возникающий вследствие миграции фрагментов данных и вычислений между процессорами.

Разработана и реализована исполнительная система, реализующая предложенный алгоритм. Исследовано влияние параметров алгоритма балансировки на эффективность его работы для ряда задач численного моделирования.

Подсистема автоматического обнаружения логических ошибок в MPI-программах информационно-вычислительного портала кемеровского государственного университета

А.Ю. Власенко

Кемеровский государственный университет, Кемерово

При разработке параллельных программ возникает большое количество логических ошибок, которые крайне трудно обнаружить без использования специальных программных средств. Все множество таких ошибок можно разделить на локальные (для обнаружения которых каждому процессу не требуется информация от других) и глобальные (включающие 2 и более процессов).

Существующие в данное время инструментальные системы обнаружения семантических ошибок можно разделить по используемым подходам. Автоматический анализ корректности параллельных программ во время исполнения выделяется среди других тем, что посредством применения эвристических алгоритмов средство отладки может обнаружить ошибки, обусловленные недетерминизмом, для проведения анализа достаточно одного запуска параллельной программы и нет необходимости создавать программный код эталонной версии, также не нужно составлять

модель программы на каком-либо псевдоязыке и ожидать пока система произведет перебор всех вариантов исполнения параллельного приложения. Используемые этот метод инструментальные средства имеют существенные архитектурные недостатки. Так в системе MARMOT поиском всех типов ошибок занимается выделенный узел вычислительного кластера, называемый Debug Server. При большом числе процессов параллельного приложения он может стать узким местом, негативно влияющим на производительность выполняемой программы. В системе ITAC выявлением всех ошибок занимаются дополнительные потоки, каждый из которых работает в пределах MPI-процесса на узле кластера. Такая архитектура оптимальна для поиска локальных ошибок, но в поиске глобальных задействуются все узлы кластера, несмотря на то, что данную работу можно возложить на выделенный сервер.

В данной работе представлена масштабируемая система отладки MPI-приложений, использующая подход динамического обнаружения ошибок во время исполнения, объединяющая положительные стороны описанных выше систем. Подобно ITAC на каждом узле кластера работает дополнительный поток, выявляющий локальные ошибки. Число узлов, используемых для поиска глобальных ошибок, может задавать пользователь. По ходу работы параллельной программы процессы на вычислительных узлах вызывают MPI-функции, которые обрабатываются дополнительными потоками этих же процессов, и параметры функций отсылаются посредством механизма сокетов узлам-анализаторам (каждый процесс при вызове функции отправляет сообщение только одному узлу-анализатору). При поиске семантических ошибок некоторых типов узел-анализатор задействует несколько потоков, максимально используя, таким образом, ресурсы многопроцессорного и/или многоядерного вычислительного ресурса.

Разрабатываемая система автоматического контроля корректности планируется к внедрению в информационно-вычислительный портал Кемеровского государственного университета в качестве подсистемы. Для использования данной подсистемы потребуется линковка программы пользователя со статической библиотекой собственной разработки при компиляции и запуск программы, производящей анализ на наличие глобальных ошибок на указанном пользователем количестве узлов-анализаторов при исполнении MPI-программы пользователя.

Система автоматизированного поиска шаблонов неэффективного поведения UPC-программ

Н.Е. Андреев

Кемеровский государственный университет, Кемерово

Согласно отчету Межведомственной комиссии по развитию сверхмощных вычислений США эффективность современных параллельных систем находится ниже отметки в 10% [1]. В условиях резкой нехватки производительности программистам необходимы инструменты анализа эффективности и оптимизации программ. Такие инструменты, как КОЖАК и ТАУ доказали свою полезность в вопросах анализа критичных ко времени приложений. Тем не менее, большинство из них работают с ограниченным набором программных моделей, преимущественно с моделью передачи сообщений. В результате разработчики, использующие новые модели параллельного программирования, в частности модель глобального адресного пространства (GAS), вынуждены вручную выполнять трудоемкий анализ при оптимизации своей программы. Данная работа посвящена разработке инструмента автоматизированного поиска шаблонов неэффективного поведения параллельных программ для программной модели разделенного глобального адресного пространства (PGAS). В частности для языка Unified Parallel C (UPC) [2]. Традиционная модель передачи сообщений, реализованная в MPI, доминирует сегодня в области крупномасштабных параллельных комплексов. Тем не менее, ограничения этой модели, которые значительно снижают продуктивность разработки, широко признаны, поэтому PGAS модели набирают популярность [3].

В основе разрабатываемого инструмента лежит экспертная система, которая в процессе анализа ищет в трассировочных файлах шаблоны неэффективного поведения. То как эти шаблоны представлены внутри системы, позволяет фиксировать сложные ситуации, не охватываемые профилировочными инструментами и визуализаторами трасс. Шаблоны – это составные события, то есть набор найденных в трассировочном файле вызовов, которые удовлетворяют условиям возникновения ситуации, описываемой шаблоном. Так как составные события обычно включают в себя сложные меж-событийные связи, необходимы высокоуровневые структуры данных, которые способны отслеживать и предоставлять в нужный момент такую информацию. Поэтому в экспертной системе предусмотрен не последовательный, а произвольный доступ к событиям в файле трассы и два типа абстракций: состояния и указатели. Состояние представляет собой стек вызовов и создается для каждой нити параллельного приложения. Указатель – это атрибут события, который связывает его с другим событи-

ем. Например, выход из коллективной операции ассоциируется с входами в нее в каждой из нитей. После проверки трассы пользователь может посмотреть в каких местах программы найдены соответствия шаблонам и оптимизировать исходный код.

Литература

1. Federal Plan for High-End Computing: Report of the High-End Computing Revitalization Task Force (HECRTF), 2004, http://www.nitrd.gov/pubs/2004_hecrtf/20040702_hecrtf.pdf.
2. UPC Consortium: UPC Language Specifications v1.2. Lawrence Berkeley National Lab Tech Report LBNL-59208 (2005).
3. DARPA High Productivity Computing Systems (HPCS) Language Effort <http://www.highproductivity.org/>.

Задание управления во фрагментированных программах сетями Петри и проверка корректности управления

В.В. Ларин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

С помощью параллельных вычислительных машин стало возможным решать задачи, которые раньше не поддавались решению на последовательных компьютерах. Однако применение новых вычислительных мощностей связано со сложностями организации параллельных вычислений: необходимо уделять существенное внимание управлению ресурсами вычислительной системы (а не прикладному аспекту вычислений), крайне сложно создать одинаковые условия выполнения параллельной программы для разных её запусков.

Эти внутренние сложности организации вычислений проявляются в сложности средств разработки и отладки параллельных программ.

Для упрощения создания параллельных программ необходимо создание систем автоматизированной разработки параллельных программ. В качестве такой системы в ИВМиМГ СО РАН разрабатывается система фрагментированного программирования. Сети Петри являются инструментом для задания поведения систем и позволяют анализировать свойства этих систем.

В работе предлагается использовать сети Петри в качестве средства задания управления во фрагментированных программах. Использование сетей Петри позволяет обеспечить необходимые свойства системы про-

граммирования, такие как удобство задания управления и автоматизацию контроля корректности управления.

Были спроектированы и реализованы:

- язык (на основе сетей Петри) для задания управления и частичного отображения вычислений и данных на ресурсы вычислительной машины в системе фрагментированного программирования. Для описания программы на этом языке необходимо задать управляющую сеть Петри, таблицу отображения данных алгоритма на ресурсы компьютера, таблицу фрагментов для исполнения;
- компилятор языка, переводящий текстовое представление интерпретированной сети Петри во внутреннее представление исполнительской системы. Внутреннее представление программы не связано с какой-то конкретной исполнительской системой, существует интерфейс взаимодействия;
- прототип исполнительской системы, позволяющий эмулировать исполнение программы. Возможна интеграция с другими исполнительскими системами;
- модуль, проверяющий управление в программе на ошибки, такие как дедлок, недетерминированность результата, недостижимость нужного результата, бесконечные циклы. Данные ошибки выбраны как наиболее типичные ошибки, допускаемые на стадии проектирования управления программы.

Литература

1. Синтез параллельных программ и систем на вычислительных моделях / В.А. Вальковский, В.Э. Малышкин. – Новосибирск : Наука. Сибирское отделение, 1988. – 129 с.
2. Malyshkin V.E., Sorokin S.B., Chajuk K.G. Fragmentation of Numerical algorithms for the Parallel Subroutines Library // In proc. of the 10th International Conference on Parallel Computing Technologies (PaCT-2009), LNCS Vol. 5698, Springer. P. 331-343, 2009.

Ускорение цифровой обработки сигналов за счет технологии параллельных вычислений CUDA на базе видеочипов NVIDIA

В.И. Иордан, А.А. Соловьев

Алтайский государственный университет, Барнаул

Методы фильтрации в задачах «цифровой обработки сигналов (ЦОС)» используют, как правило, скалярные произведения компонентов сигналов, либо суммирование отсчетов сигнала с весовыми коэффициентами и т.п. (явный параллелизм). Основной объем вычислений приходится

на выполнение многократного пересчета массивов в «тесновложенных» друг в друга циклах. Подобные вычисления выполняются в задачах 3D-графики, поэтому повысить эффективность параллельной обработки сигналов можно оптимизацией распределения вычислительной нагрузки между универсальными процессорами CPU и GPU-процессорами графических приложений. Программно-аппаратная архитектура для расчетов на видеочипах NVIDIA использует платформу CUDA – C-подобный язык программирования со своим компилятором и библиотеками для вычислений на GPU, применяемых, например, в видеокартах GeForce различных серий. Модель архитектуры памяти содержит быструю глобальную память с доступом к ней всех мультипроцессоров видеочипа, локальную память в каждом мультипроцессоре, а также специальную память для констант. Ядра мультипроцессора в GPU являются SIMD-ядрами (как и в CPU), плюс к тому же применяется архитектура SIMT (одна инструкция и несколько потоков) для скалярной обработки потоков. SIMT в отличие от SIMD поддерживает независимое функционирование отдельных потоков. CPU исполняет 1-2 потока вычислений на одно процессорное ядро, а видеочипы могут поддерживать до 1024 потоков на каждый мультипроцессор видеочипа. CPU переключается с потока на поток за сотни тактов, а GPU – за один такт. Т.е., видеочип способен за счет иерархии потоков производить гораздо большее количество арифметических повторяющихся по структуре вычислений, чем CPU. Потоки объединяются в блоки потоков (thread blocks) – одно- или двумерные сетки потоков, взаимодействующих между собой при помощи разделяемой памяти и точек синхронизации. Программа (ядро – kernel) исполняется над сеткой (grid) блоков потоков. Блоки потоков выполняются в виде небольших групп, называемых «warp» размером в 32 потока (и более). Модуль SIMT, выполняемый мультипроцессором видеочипа, управляет потоками, составляющими группу «warp». Группировка блоков в сетки позволяет уйти от ограничений и применять ядро к большему числу потоков за один вызов, что способствует «масштабируемости» приложений. Упрощенный алгоритм управления потоками может выглядеть так:

1. Получая блок потоков, мультипроцессор разделяет их на группы warp (32 потока);
2. Во время работы модуль SIMT выбирает группу потоков, готовую для выполнения, и затем выбирает следующую инструкцию для потоков;
3. Общая инструкция для всех потоков warp выполняется для них одновременно;

4. При ветвлении потока инструкций инструкции каждого потока выполняются последовательно, пока поток инструкций для нитей `warp` не станет общим.

Тестовые расчеты фильтрации сигналов с использованием технологии CUDA подтверждают ускорение более, чем в 10 раз. Большого эффекта можно ожидать за счет встречного сближения технологий вычислений на базе CPU и GPU, так как видеочипы становятся все более универсальными (расчеты с плавающей точкой одинарной и двойной точности), а CPU – все более «параллельными» (несколько ядер, многопоточность, наличие блоков SIMD и гетерогенных процессоров).

Представление алгоритмов в технологии фрагментированного программирования

В.А. Перепелкин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Работа посвящена рассмотрению вопроса формального представления фрагментированных программ в языке программирования с точки зрения пользователя, компилятора и исполняющего окружения. Подход фрагментированного программирования состоит в том, что алгоритм представляется в виде композиции т.н. фрагментов данных и фрагментов вычислений над этими фрагментами данных, и задается управление, определяющее способ исполнения программы. Кроме этого, программа снабжается дополнительной информацией о структуре ее данных и вычислений и рекомендуемом способе ее исполнения на том или ином классе параллельных компьютеров. Такое представление позволяет исполнить программу эффективно для класса задач численного моделирования, при этом автоматически обеспечивая исполнение динамическими свойствами – динамической балансировкой загрузки, настройкой на имеющееся оборудование, осуществлением коммуникаций на фоне вычислений.

К представлению фрагментированных программ предъявляются следующие требования. Пользователь должен задать свой алгоритм в этом представлении на высоком уровне, без описания низкоуровневых операций управления процессами, пересылками данных и синхронизации. Транслятор анализирует программу, оптимизирует ее, настраивает на конкретный параллельный компьютер и осуществляет предварительное планирование вычислений с учетом как структуры программы, так и рекомендаций пользователя. Представление алгоритма должно содержать всю необходимую для этого информацию. В результате транслятор генерирует

исполняемую программу. Специальная исполнительная система выполняет сгенерированную программу в соответствии с составленным планом. Исполнительная система осуществляет оптимизацию и принятие решений времени исполнения (распределение ресурсов, планирование вычислений).

Разработан язык LUNA (LangUage for Numerical Algorithms), позволяющий представлять численные алгоритмы с учетом перечисленных требований. Программа описывает фактические фрагменты данных и вычислений, минимальное управление, необходимое для корректной работы программы. Дополнительно описывается отношение соседства на множестве фрагментов данных и вычислений, и информацию о рекомендуемом способе исполнения программы и отображении на ресурсы

Разработан и реализован транслятор с языка LUNA в представление, исполняемое на исполнительной системе. Ряд численных алгоритмов представлен в разработанном языке. Работоспособность транслятора протестирована на этих программах.

Runtime-система FP RTS управления исполнением фрагментированных программ на мультикомпьютере

Г.А. Щукин

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Фрагментированное программирование подразумевает сборку программы [1,2] из множества исполнительных единиц - фрагментов. Исполнение фрагментированной программы заключается в запуске (параллельном) всех ее фрагментов вычислений, которые получаются соединением фрагментов кода с фрагментами данных.

Главная особенность фрагментированной программы - ее потенциальные динамические свойства: подстройка под ресурсы вычислительной системы для оптимального исполнения через изменение размера и числа фрагментов; динамическая балансировка нагрузки через перераспределение фрагментов между вычислительными узлами; коммуникации между фрагментами на фоне вычислений.

Разработанная автором runtime-система [3] FP RTS осуществляет динамическое (для полноценной реализации всех полезных свойств) управление исполнением фрагментированных программ. Наличие качественной runtime-системы актуально ввиду большого распространения параллельных вычислительных систем и требования наличия высокопроизводительных параллельных реализаций численных алгоритмов.

Для описания фрагментированных программ и работы с FP RTS разработан специальный интерфейс (API). Описание фрагмента с помо-

щью интерфейса заключается в описании его входных и выходных переменных (данных) и производимых над ними вычислений; фрагментированной программы – в описании используемых в ней фрагментов кода и данных и связях между ними.

FP RTS обеспечивает исполнение фрагментированных программ на вычислительных машинах широкого класса – мультипроцессорах и мультикомпьютерах. Для работы runtime-системы на каждом вычислительном узле запускается отдельный менеджер FP RTS. Менеджер обеспечивает параллельный запуск готовых (получивших все входные данные) фрагментов на узле, а все менеджеры вместе – исполнение фрагментированных программ на всей вычислительной системе. Менеджеры FP RTS осуществляют автоматическое распределение фрагментов данных и вычислений по узлам, связь фрагментов данных с нужными фрагментами кода, передачу данных и фрагментов между узлами, присвоение приоритетов фрагментам (приоритет используется для выбора наилучшего фрагмента для исполнения), динамическую балансировку нагрузки.

В настоящий момент для FP RTS созданы фрагментированные версии таких алгоритмов, как операции с матрицами, LU и QR разложения, конечно-разностные схемы.

Литература

1. Вальковский В.А., Малышкин В.Э. Синтез параллельных программ и систем на вычислительных моделях. –Новосибирск: Наука, 1988, 128 с.
2. Malyshkin V.E. Fragmented Programming of Library Parallel Numerical Subroutines // In the Proceedings of the 7-th Int. conference on New Trends in Software Methodologies, Tools and Techniques, IOS Press, Vol. 193. P. 425-430. 28-30 September, 2007, Dubai.
3. Kalgin K.V., Malyshkin V.E., Nechaev S.P., Tschukin G.A. Runtime System for Parallel Execution of Fragmented Subroutines // PACT-2007, LNCS Vol. 4671. P 544-552.

Сервис-ориентированная архитектура доступа к ресурсам высокопроизводительных вычислительных систем

И.В. Бойченко, С.В. Корытников, А.В. Лежанкин

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск

Высокопроизводительные вычислительные системы (ВПВС) в силу высокой стоимости являются разделяемым ресурсом на крупном предприятии или в научном центре. При этом, в силу архитектурных особенностей, применение ВПВС требует особой модели программирования. Об-

щепризнанно, что программное обеспечение (ПО) для суперкомпьютеров и вычислительных кластеров является гораздо более трудоемким в разработке, чем обычное ПО, рассчитанное на применение одного процессора.

Следует отметить, что не всегда вычислительные задачи требуют применения ВПВС. Необходимость возникает, когда размер (размерность) входных данных превышает некоторый порог, за которым время выполнения задачи на одном процессоре (вычислительном блоке) становится неприемлемо большим.

Мы задались следующими вопросами:

1. Следует ли при необходимости применения ВПВС переносить все созданное ранее программное обеспечение (со всей своей функциональностью), с других платформ, например, персональных ЭВМ, на высокопроизводительные?
2. Можно ли отдельные функции (работа с большими массивами данных, решение вычислительно трудоемких задач и др.) реализовать в виде информационных сервисов, доступных по требованию?

Понятно, что полный перенос всех возможностей с одной платформы на другую - очень трудоемкое решение, и уж тем более не по силам одному разработчику. Но в случае положительного ответа на второй вопрос, можно получить гибкую инфраструктуру, в которой ВПВС предоставляют набор сервисов, доступных по требованию. Такая организация доступа, получившая название сервис-ориентированной, позволяет снизить стоимость разработки ПО для решения задач с применением ВПВС, и, следовательно, повысить коэффициент полезного действия таких дорогостоящих систем, а также обеспечить возможность включения ВПВС в состав регулярно действующих информационных систем, таких, например, как поисковые системы.

В настоящее время имеется два, отчасти пересекающихся, направления развития технологий распределенных вычислений, имеющих некоторые необходимые, но недостаточные, на данный момент, свойства для организации сервис-ориентированной архитектуры доступа к ресурсам ВПВС: "Облачные вычисления" (Cloud computing) [1,2] и GRID [3,4]. Нами начаты исследования и эксперименты в этих направлениях. В качестве ВПВС, ресурсы которой предполагается предоставить в виде набора информационных сервисов, используется вычислительный кластер нашего университета (<http://cluster.tusur.ru>).

Литература

1. Cloud computing [Электронный ресурс] / Википедия. Свободная энциклопедия. - 2009 - Режим доступа: http://en.wikipedia.org/wiki/Cloud_computing, свободный.

2. Grid computing [Электронный ресурс] / Википедия. Свободная энциклопедия. - 2009. -Режим доступа: http://en.wikipedia.org/wiki/Grid_computing, свободный.
3. Cloud Computing: высокая облачность [Электронный ресурс] / Авт. Андрей Крупин. - Электрон. журнал - М. : Компьютерра, 2009. - Режим доступа: <http://www.computerra.ru/interactive/461761/>, свободный.
4. Распределённые вычисления, GRID-технологии или кластеры? [Электронный ресурс] / Авт. Леонид Черняк - Электрон. Журнал. - М. : Открытые системы, 2004. - Режим доступа: <http://www.osp.ru/cw/2004/04/72923>, свободный.

Научное издание

Пятая Сибирская конференция по параллельным и высоко-
производительным вычислениям

Программа и тезисы докладов
(1-3 декабря 2009 года)

Редактор В.Г. Лихачева
Компьютерная верстка Е.А. Данилкин

Подписано в печать 20.10.2009 г.
Формат 60x84 ¹/₁₆. Бумага офсетная №1. Печ. л. 5,4; усл. печ. л. 5,0;
уч.-изд. л. 4,8. Тираж 100 Заказ 927

ОАО «Издательство ТГУ», 634029, г. Томск, ул. Никитина, 4
ООО «Типография «Иван Федоров»», 634003, г. Томск, Октябрьский взвоз, 1