

КОМП'ЮТЕРНІ ЗАСОБИ, МЕРЕЖІ ТА СИСТЕМИ

I. Varava

ORGANIZATION OF COMPLEX CALCULATIONS IN THE FIELD OF INTERBRANCH RESEARCH

An overview of the methods of computing and software construction for calculations in modeling of complex physical objects or processes.

Key words: complex calculation, interbranch research.

Проводиться огляд методів побудови обчислювальних і програмних засобів для розрахунків, які зустрічаються при моделюванні складних фізичних об'єктів або процесів.

Ключові слова: складні обчислення, міжгалузеві дослідження.

Проводится обзор методов построения вычислительных и программных средств для вычислений встречающихся при моделировании сложных физических объектов или процессов.

Ключевые слова: сложные вычисления, межотраслевые исследования.

© И.А. Варава, 2013

УДК 004.942

И.А. ВАРАВА

ОРГАНИЗАЦИЯ СЛОЖНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ОБЛАСТИ МЕЖОТРАСЛЕВЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Введение. Прогресс в понимании физической картины мира требует все более сложных научных исследований. Современное научное исследование широко использует методы компьютерного эксперимента. Развитие сетевых и компьютерных технологий способствует решению сложных прикладных задач. Для создания необходимой вычислительной мощности используются специфические технологии интеграции компьютерных средств, использующие распределённые вычисления, Grid-технологии и облачные вычисления.

Основными областями применения сложных вычислений являются криптография, прогнозирование, физика высоких энергий, вычислительные биология, химия, медицина.

Практическое значение имеет целенаправленная разработка новых или специальных материалов, обладающих улучшенными эксплуатационными характеристиками, изделия из которых планируется использовать в экстремальных условиях. Основываясь на законах макро- и микроуровня, учитывая квантово-механические принципы, существующие методы позволяют предсказать поведение системы взаимодействующих частиц, используя сложный математический аппарат. Среди используемых уравнений особое место занимают последовательность уравнений Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (цепочка ББГКИ) [1], уравнение Власова, Шредингера и др. Получение материалов с заданными характеристиками основывается на исследовании кинетических процессов и

определении их оптимальных параметров.

Наиболее распространены реализации методов Монте-Карло [2] и молекулярной динамики [3] в программном обеспечении моделирования таких процессов.

Метод молекулярной динамики используется для моделирования временной эволюции молекулярных систем путем численного интегрирования уравнений движения ансамбля частиц. В этом случае проводится численный эксперимент динамического типа [3]. В работе [1] проводился эксперимент по моделированию релаксации быстрого потока горячих атомов в расплаве, используя кластер Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. Решалась система интегро-дифференциальных уравнений (1) для s – частичных функций распределения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_s}{\partial t} + \sum_{i=1}^s v_i \frac{\partial f_s}{\partial r_i} + \sum_{i=1}^s F_i^b \cdot \frac{\partial f_s}{\partial p_i} + \sum_{i,j=1}^s F_{ij}^b \cdot \frac{\partial f_s}{\partial p_i} = \\ = \sum_{i=1}^s (s - N) \frac{\partial}{\partial p_i} \int F_{i,s+1} f_{s+1} d\Omega_{s+1}. \end{aligned} \quad (1)$$

Первоначальное распределение скоростей атомов популяции удовлетворяло распределению Максвелла:

$$\Phi(V) = N(m/2k)^{1/2} (kT)^{-3/2} \exp(-mV^2/2kT). \quad (2)$$

Результаты распределения скоростей атомов показаны на рисунке.

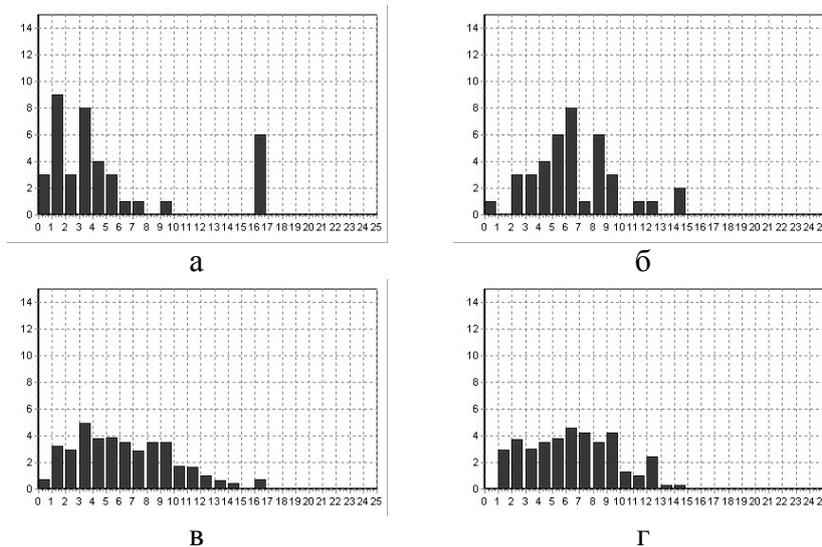


РИСУНОК. Гистограммы распределения скоростей атомов в расплаве металла

Технические средства организации вычислительных мощностей.

Исторически сложилось так, что первым основным компонентом компьютера являлся центральный процессор. Сегодня разрабатываются процессоры с внутренней поддержкой параллелизма.

В отличие от многоядерных процессоров, в которых число N ядер невелико ($N < 16$), в графических процессорах их размещается значительно больше ($N \geq 100$). Развивается сектор Single Instruction Multiple Data (SIMD) – систем с общей памятью.

Суперкомпьютеры. Compute Unified Device Architecture (CUDA) – это архитектура параллельных вычислений от NVIDIA, позволяющая существенно увеличить вычислительную производительность благодаря использованию GPU (графических процессоров).

С помощью упомянутой выше элементной базы строятся вычислительные системы в форме суперкомпьютеров. Суперкомпьютер по определению содержит множество процессоров, соединённых высокоскоростной локальной шиной. В работе [4] приводится классификация масштабируемых вычислительных систем и выделяются следующие типы:

мультикомпьютер – это совокупность узлов (машин фон Неймана), которые управляются собственными операционными системами (ОС) и объединены сетью;

кластер – набор компьютеров, соединённых высокоскоростными каналами связи, который представляется ОС как единый аппаратный ресурс;

SMP – симметричные мультипроцессоры;

DSM – системы с распределённой разделяемой памятью;

MPP – массово параллельные системы.

На сегодняшний день самым мощным суперкомпьютером, согласно списку топ-500 за ноябрь 2012 года [5], является Titan-Cray XK7 установленный в национальной лаборатории Оук-Ридж Министерства энергетики США. Он имеет 560640 ядер, которые размещены в центральных 16-ядерных процессорах AMD Opteron 6274 и графических процессорах NVIDIA Tesla K20x. Производительность по тесту Linpack оценивается в $R_{max} = 17590$ ТФлоп/с.

Grid-технологии. Grid – это технология для управления большим числом глобально распределённых вычислительных ресурсов. Grid представляет глобальные услуги виртуализации и вычислений. Основные ресурсные блоки Grida – это суперкомпьютеры и суперкомпьютерные центры, соединённые высокоскоростными сетями передачи данных. Для комплексных межотраслевых исследований созданы и развиваются следующие Grid-инфраструктуры:

- EGI – Европейская Grid-инфраструктура;
- NGI – Национальная Grid-инфраструктура и др.

Добровольные Grid-технологии. Это способ организации распределённых вычислений, при котором используются компьютеры добровольцев. На компьютере устанавливается клиентское программное обеспечение, получающее от сервера данные для обработки и возвращающее результаты.

Наиболее популярной платформой для добровольных вычислений является платформа BOINC, разработанная в Калифорнийском университете в Беркли.

Существуют проекты, которые кроме центрального процессора активно используют другие компоненты клиентского компьютера: видеокарту (GPU) и оперативную память.

Научные Grid-технологии. Крупнейшим научным проектом, использующим Grid- технологию, является Large Hadron Collider Grid (LCG) – вычислительная среда для анализа данных экспериментов проводимых на Большом Адронном Коллайдере в ЦЕРН (Швейцария).

Коммерческие Grid-технологии. Сфера бизнеса также заинтересована в высокопроизводительных вычислениях. Oracle предлагает решение Oracle 10G – платформу для коммерческих приложений в среде Grid.

Технологии распределенных вычислений. Для повышения производительности вычислений за счет распараллеливания проводятся исследования в области разработки методов распараллеливания и методов балансировки.

Message Passing Interface (MPI) – интерфейс передачи сообщений между процессами, выполняющими одну задачу. Применяется для систем с распределенной памятью;

Open MP – открытый стандарт для программирования многопоточных приложений на многопроцессорных системах с общей памятью;

CORBA – архитектура брокеров распределенных объектных запросов;

DCOM (Distributed Component Object Model) – распределенная многокомпонентная модель;

SOA – сервис-ориентированная архитектура.

Выводы. Таким образом, в работе проведен анализ современных средств организации сложных вычислений, находящихся место при решении актуальных задач современных научных экспериментов.

Показано применение методов молекулярной динамики и метода Монте-Карло при моделировании процесса кристаллизации металлического расплава.

С помощью соответствующих технических и программных средств сегодня можно проводить эффективные экспериментальные исследования, находить подтверждения гипотезам, которые выдвигают ученые-теоретики в междисциплинарных исследованиях [6 – 8].

1. *Кривонос Ю.Г., Писаренко В.Г., Варава И.А.* Моделирование интеллектуального управления кристаллизацией металлических расплавов // Искусственный интеллект. – 2009. – № 3. – С. 234 – 241.
2. *Соболь И.М.* Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука, 1973. – 312 с.
3. *Товбин Ю.К.* Метод молекулярной динамики в физической химии. – М.: Наука, 1996. – 334 с.
4. *Топорков В.В.* Модели распределенных вычислений. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 320 с.
5. *November 2012 _ TOP500 Supercomputer Sites* – [Электронный ресурс] / Режим доступа: <http://www.top500.org/lists/2012/11/>
6. *Писаренко В.Г.* Системний аналіз складних об'єктів. – К.: УкрІНТЕІ, 2009. – 133 с.

7. Писаренко В.Г., Писаренко Ю.В. Разработка информационно-аналитической системы поддержки принятия решений по управлению опасными быстропротекающими технологическими происшествиями // Пр. конф. Міжнародна конференція 50 років Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ, 24 – 26 грудня 2007 року. – Київ, 2008. Вид-во ІК НАН України.
8. Писаренко В.Г., Писаренко Ю.В., Мелкумян Е.Ю. и др. Применение робототехники для обследования шахты после обвала // Искусственный интеллект. – 2010. – № 4. – С. 528 – 534.

Получено 30.05.2013