
IV РОССИЙСКО-ГЕРМАНСКАЯ ШКОЛА ПО ПАРАЛЛЕЛЬНОМУ
ПРОГРАММИРОВАНИЮ И ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМ СИСТЕМАМ

Новосибирск, Академгородок, 9–20 июля 2007 года

АННОТАЦИИ ДОКЛАДОВ
НАУЧНОЙ СЕССИИ

В 2007 году в Институте вычислительных технологий СО РАН проходила ставшая уже традиционной Российско-германская школа по параллельному программированию. В ее работе приняли участие 60 молодых ученых, аспирантов и студентов из России и Казахстана. Учебная программа школы включала 25 лекций, подготовленных сотрудниками Штутгартского центра высокопроизводительных вычислений, а также доклады приглашенных российских ученых. В рамках научной сессии участниками школы было представлено девять докладов, посвященных фундаментальным вопросам параллельного программирования и применению высокопроизводительных вычислений для решения практических задач.

Д.Е. Айжулов

Казахский национальный университет им. аль-Фараби

РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ В ON-LINE-РЕЖИМЕ
С ПОМОЩЬЮ GRID-ВЫЧИСЛЕНИЙ

Предполагается создание grid-компьютера на основе трехуровневой платформы для решения прикладных задач с использованием параллельных технологий MPI. Доступ к grid-компьютеру осуществляется в on-line-режиме. Использование схемы, которая описана в данной работе, позволит построить Интернет-сервис, дающий возможность решать актуальные прикладные задачи, не выходя из дома.

Н.А. АЛЕМАСОВ, Э.С. ФОМИН

Институт цитологии и генетики СО РАН

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА
И ВИРТУАЛЬНОГО СКРИНИНГА

В докладе представлен диспетчер параллельных процессов для управления задачами молекулярного докинга и виртуального скрининга. Диспетчер включает три подпрограммы: 1) расщепление задачи на ряд независимых подзадач; 2) распределение подзадач по потокам выполнения; 3) сбор результатов в объект, необходимый в дальнейшей работе программы. Алгоритм диспетчера пригоден для широкой области решаемых задач, поскольку независим от обрабатываемых данных и от функций их обработки, которые предоставляются как параметры. Для реализации использован язык C++ и интерфейс MPI. Диспетчер входит в состав библиотеки программных компонентов MOLKERN, которая предназначена для поддержки высокопроизводительных вычислений в области молекулярного моделирования в рамках метода полноатомного силового поля.

Р.Н. АРАПБАЕВ

Институт систем информатики СО РАН

АНАЛИЗ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПО ДАННЫМ: СТРАТЕГИИ ТЕСТИРОВАНИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Анализ зависимостей по данным является фундаментальным компонентом в распараллеливающих компиляторах. К настоящему времени разработаны многие алгоритмы для анализа зависимостей по данным.

В данной работе проведено экспериментальное сравнение результатов предложенного нового метода с наиболее известными стратегиями тестирования анализа зависимостей по данным, такими как Эпсилон-тест и алгоритм Майдана. Эксперимент проведен с использованием инструмента Petit, разработанного в Мэрилендском университете как расширенный вариант инструмента tiny, и с применением системы SUIF, разработанной в Стэнфордском университете. Для эксперимента использованы два вида данных. Первый вид — набор тестовых научных программ NASA и PERFECT Club benchmarks, где каждая программа содержит от 500 до 18000 строк; второй вид — набор из 16 циклов, собранный из статей, аналогичных представляемой здесь работе.

Экспериментальное исследование показывает, что при анализе зависимостей по данным на эталонных тестовых программах NASA и PERFECT Club benchmarks результаты нового алгоритма очень близки к результатам алгоритма Майдана. Хотя алгоритм Майдана считается дорогим и точным тестом, а предложенный новый алгоритм имеет полиномиальную временную сложность в наихудшем случае, в общем случае алгоритм Майдана требовал времени на 25 % больше, чем алгоритм новой стратегии.

Сравнение результатов на экспериментальных примерах показало, что новый алгоритм выявляет примерно на 12 % больше ложных зависимостей, чем аналогичные приближенные алгоритмы (Эпсилон-тест), и только примерно на 6 % уступает алгоритму Майдана.

Д.В. БАННИКОВ, С.Г. ЧЕРНЫЙ, Д.В. ЧИРКОВ, В.А. СКОРОСПЕЛОВ, П.А. ТУРУК

Институт вычислительных технологий СО РАН

ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ СИСТЕМ В ЗАДАЧЕ ОПТИМИЗАЦИОННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ГИДРОТУРБИН

Проектирование элементов проточного тракта турбомашин представляет собой чрез-

вычайно трудоемкую задачу, что обусловлено сложностью трехмерного течения рабочей жидкости в криволинейном проточном тракте машины и набором, вообще говоря, противоречивых требований, предъявляемых проектировщиком.

Авторами был предложен метод автоматического проектирования проточной части РК гидротурбины, основанный на последовательности расчетов трехмерных течений несжимаемой жидкости в РК и поиске такой формы РК, которая обеспечивает минимум одного или нескольких заданных целевых функционалов. В основу оптимизационного комплекса положен генетический алгоритм, требующий расчета потока в РК для нескольких тысяч вариаций геометрии. Решение уравнений движения жидкости для одной геометрии занимает около 3 минут, а общее время оптимизационного расчета на одном процессоре составляет около 3 суток. Задачи многоцелевой оптимизации требуют еще больших объемов вычислений. Как следствие, необходимо выбирать компромиссное решение между количеством исследуемых форм в поиске наилучшей геометрии, подробностью сеток, сложностью используемых моделей движения жидкости и разумным временем, затрачиваемым на такой поиск.

Использование в данном случае кластерных ЭВМ — наиболее перспективного метода преодоления ограничений, свойственных однопроцессорным машинам, и позволило существенно сократить время счета. В настоящей работе рассмотрены варианты применения многопроцессорных систем при решении задачи оптимизационного проектирования.

Ю.Н. ЗАХАРОВ, А.В. ЧИРЮКИНА

Кемеровский государственный университет

ВЛИЯНИЕ ФИЛЬТРАЦИИ НА ТЕЧЕНИЕ ИДЕАЛЬНОЙ СТРАТИФИЦИРОВАННОЙ ЖИДКОСТИ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПРИМЕСЕЙ В ПРОТОЧНОМ ВОДОЕМЕ

Изучение распространения примесей в закрытых водоемах важно для предупреждения экологических катастроф. При наличии процессов фильтрации в водоеме характер распространения примесей может существенно изменяться, подвергаясь влиянию течения в водоеме. Если водоем имеет сложную форму, не одно входное и выходное отверстия, то возникают проблемы не только с изучением характера течения, но и с постановкой граничных условий для дифференциальной задачи.

Данная работа посвящена изучению течения жидкости и распространения примесей в проточном водоеме сложной формы. Предлагается способ постановки граничных условий, обеспечивающий баланс втекающей и вытекающей жидкости с учетом того, что количество втекающей жидкости может изменяться за счет фильтрации, объем которой достаточно сложно учесть. Построен алгоритм изучения характера течения и распространения примесей, когда фильтрация зависит от разности давлений внутри области течения и вне ее.

М.Д. КАЛУГИН

Институт системного программирования РАН

РАЗРАБОТКА ПАРАЛЛЕЛЬНОГО АЛГОРИТМА КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ МОЛЕКУЛ ВОДЫ В СРЕДЕ PARJAVA

Рассматривается масштабируемая параллельная программа, моделирующая тепловое движение молекул воды в кубической ячейке методом Монте-Карло. Программа разрабатывалась в Институте системного программирования РАН в сотрудничестве с Институтом математических проблем биологии РАН с использованием среды ParJava.

Физические характеристики изучаемой системы рассчитываются по статистически значимой выборке молекулярных конфигураций элементарной ячейки, осуществляемой методом Монте-Карло по алгоритму Метрополиса, реализуемому по классической схеме.

Параллельная программа была проанализирована инструментами среды ParJava, что позволило выявить места в программе, требующие оптимизации. Изменения, которые внесены в параллельный алгоритм, позволили в зависимости от объема данных сократить время работы программы в несколько раз, кроме того, позволили увеличить размеры моделируемых систем.

В ходе тестов на 27 процессорах была промоделирована система, имеющая размеры $1000 \times 1000 \times 1000 \text{ \AA}$, содержащая более 1 млн молекул. Дальнейшая работа связана с моделированием водно-ионной оболочки ДНК, планируется также исследование и оптимизация параллельного алгоритма с помощью средств динамического анализа, предоставляемых средой ParJava.

Л.Ю. ПРОКОПЬЕВА, Д.Л. ЧУБАРОВ

Институт вычислительных технологий СО РАН

ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ПРОГОНКИ

Необходимость решения систем линейных уравнений с трехдиагональной матрицей возникает во многих приложениях численного анализа. У авторов доклада такая необходимость возникла при моделировании прямой записи волоконных световодов с помощью фемтосекундных лазерных импульсов. Основной фактор, лимитирующий скорость вычислений, — пропускная способность контроллера памяти компьютера. При решении задачи в осесимметричной постановке, чтобы преодолеть это ограничение, возникает необходимость в распараллеливании прогонки. В работе представлены результаты измерения ускорения для алгоритма параллельной прогонки Коновалова, Яненко, Бугрова и Шустова, предназначенного для использования на компьютерах с распределенной памятью. Трудоемкость параллельной прогонки вдвое выше, чем у последовательной версии алгоритма, однако уже при использовании трех параллельных процессов наблюдается ускорение расчетов. Измерения проводились на кластерах с различными типами процессоров и внутрикластерных сетей. При расчете с использованием 32 параллельных процессов было получено более чем 20-кратное ускорение по сравнению с последовательной прогонкой.

А.В. РЕДЬКИН

Сибирский федеральный университет

СОБЫТИЙНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНО-ПОТОКОВЫХ ПРОГРАММ

Функционально-потокосая модель параллельных вычислений лежит в основе языка

программирования ПИФАГОР. Она позволяет задавать алгоритм в виде графа информационных зависимостей, описывать динамический параллелизм и использовать принцип максимального параллелизма. Предлагается метод интерпретации на основе очереди событий для исполнения параллельных функционально-поточковых программ. Очередь событий при инициализации заполняется событиями готовности к вычислениям вершин информационного графа, соответствующих константным операторам. События из очереди передаются в соответствии с графом информационных зависимостей, и в случае завершения каких-либо вычислений новые события поступают в очередь. Событийный подход к интерпретации параллельных функционально-поточковых программ позволяет разрабатывать исполнители для различных параллельных архитектур путем создания нескольких очередей событий и нескольких обработчиков событий для каждой очереди.

И.Ф. Сайфуллин, М.Л. Хаит, А.В. Юлдашев
Институт компьютерных исследований УГАТУ

ОПЫТ СОЗДАНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ВЕРСИИ ПАКЕТА ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В работе рассматриваются параллельные версии программного комплекса, предназначенного для численного моделирования многофазных фильтрационных течений в пористой среде. Исследуются различные подходы к распараллеливанию, основанные на технологиях MPI и OpenMP. Особое внимание уделяется алгоритмам, положенным в основу модуля решения систем линейных алгебраических уравнений. Приводится ускорение, достигнутое при тестировании гидродинамического симулятора на параллельных вычислительных системах с общей и распределенной памятью. Рассматриваются причины, негативно сказывающиеся на эффективности параллельной программы. В заключение кратко описываются пути дальнейшего развития программного комплекса.