

# Параллельные вычисления при решении современных задач науки и техники

---

**А.В. Забродин, А.Е. Луцкий**

В современных условиях темпы технического прогресса и успехи в решении фундаментальных научных проблем во многом определяются уровнем развития вычислительной техники. В настоящее время общепризнанным является класс фундаментальных научных и инженерных проблем Grand challenges, эффективное решение которых возможно только с использованием мощных вычислительных ресурсов с производительностью сотен Gflops ( $\sim 10^{12}$  операций в секунду) и выше.

Чтобы обосновать потребность в указанной производительности, например, для задач аэрогазодинамики, можно привести сравнительно простой пример расчета аэродинамических характеристик изолированного крыла. Можно показать, что для получения стационарного решения уравнений Навье–Стокса необходимо выполнить порядка  $2 \cdot 10^{13}$  арифметических операций. При использовании современных персональных компьютеров на это потребуются десятки часов. На практике аэродинамического проектирования обычно требуется не отдельный расчет, а систематический перебор и анализ многих вариантов. Отсюда ясно, что только при наличии ЭВМ с производительностью, существенно превышающей показатели персональных компьютеров, численное моделирование может стать реальным инструментом проектирования летательных аппаратов.

Единственным способом достижения требуемой производительности в настоящее время является использование многопроцессорные вычислительные системы. Этот факт обусловлен реальными особенностями развития вычислительной техники.

В течение последнего десятилетия в нашей стране все более активно применялись многопроцессорные системы нарастающей производительности МВС-100, МВС-1000, разработанные совместно НИИ «Квант» РАСУ, ИПМ им. М.В. Келдыша, ИММ УРО РАН при участии других организаций. В июле 2001 г. в Межведомственном суперкомпьютерном центре (МСЦ) была введена в действие 768-процессорная вычислительная система [МВС-1000М](#) производительностью триллион арифметических операций с плавающей

запятой, с двойной точностью в секунду (1 Tflops), что значительно расширило возможности решения сложных задач с большим объемом вычислительной обработки.



### Семейство многопроцессорных суперкомпьютеров MVS-1000

Совместная разработка НИИ «Квант», ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ИММ УрО РАН

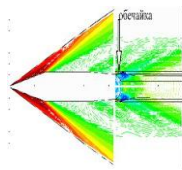
Многопроцессорные ЭВМ с распределённой памятью MVS-1000 созданы на базе процессоров Alpha. Применена оригинальная модульная схема соединения процессоров, обеспечивающая минимальную длину пути между процессорами и позволяющая создавать модули из 16, 32, 64 и 128 процессоров.

Однако, в случае многопроцессорных вычислительных систем достичь высокой производительности при решении реальных прикладных задач оказывается значительно сложнее, чем для традиционных ЭВМ. Основным требованием к алгоритму является наличие *внутреннего параллелизма*. Это означает, что алгоритм должен состоять из некоторого количества частей, которые могут выполняться одновременно и независимо друг от друга. Следующий принципиальный факт во многом определяет возможность эффективной параллельной реализации алгоритмов. Для многопроцессорных систем время обмена сообщениями между процессорами существенно превышает время доступа к своей локальной памяти и, тем более, время выполнения арифметических операций. Отсюда возникает условие *локальности* алгоритма – на каждом процессорном элементе (ПЭ) обращение к локальной памяти и выполнение арифметических операций должны происходить значительно чаще, чем обмены данными с другими ПЭ. Наконец, нужно отметить весьма желательное требование *масштабируемости*, которое означает способность алгоритма работать на произвольном числе процессоров. На практике это свойство обеспечивает высокую эффективность параллельной реализации и для конкретного числа ПЭ.

На сегодня, благодаря использованию новой высокопроизводительной техники, получено значительное продвижение в решении вычислительных проблем механики, современной физики, квантовой химии, биологии и по другим направлениям науки.

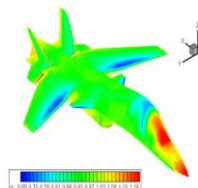
Создание и применение многопроцессорных вычислительных систем открывает новые возможности для проведения комплексного вычислительного моделирования в ведущих направлениях *механики*. Получены существенные продвижения в компьютерном проектировании летательных аппаратов различного назначения. Так, например, на этапе эскизного проектирования одного из новых самолетов удалось практически полностью отказаться от трубного эксперимента. Наиболее употребительный подход при численном моделировании обтекания летательных аппаратов состоит в использовании разностных методов. Как правило, строятся многоблочные сетки. Разбиение области течения на отдельные блоки облегчает построение сетки и способствует её адаптации к особенностям искомого течения. Кроме того, появляется возможность двухуровневого распараллеливания, что позволяет обеспечить более равномерную балансировку объема вычислений при распределении вычислительной работы по процессорам.

## Области применения суперкомпьютеров МВС-1000 в аэродинамике

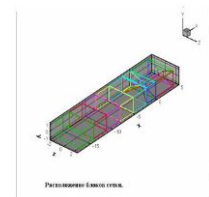


Распределение давления при сверхзвуковом обтекании (M=2.5) тела с сложной обтекаем.

*Расчёт внутренних и внешних аэрогазодинамических процессов*



*Аэродинамическое проектирование летательных аппаратов*



*Исследование влияния энерговыделения в потоке*

В последние годы в вычислительной механике широко используются дискретные модели для описания поведения материалов с микроструктурой. При сильном деформировании и разрушении возникают серьезные трудности в описании подобных процессов в рамках классической механики сплошных сред. В этой ситуации особую актуальность приобретает развитие аналитических и вычислительных моделей, которые основаны на представлении материала совокупностью взаимодействующих частиц, для которых записываются классические уравнения динамики. Взаимодействие частиц описывается посредством потенциалов взаимодействия. В качестве частиц могут задаваться не только атомы и молекулы, но и макроскопические объекты более крупного уровня.

Использование многопроцессорных вычислительных систем терафлопной производительности позволяет реализовать новые более

точные физико-математические модели описания *поведения плазмы* в широких диапазонах современных приложений, в том числе, в задачах управляемого термоядерного синтеза. Изучение свойств высокотемпературной неравновесной плазмы, уточнение моделей взаимодействия с видами излучений и электромагнитными полями составляют важный раздел современных вычислительных приложений. Одним из таких приложений являются течения плазмы в каналах при наличии магнитных полей. Это сложные многомерные задачи, решение которых требует больших вычислительных ресурсов. Их техническими приложениями являются разработки магнитных ловушек для удержания плазмы, создание двигателей малой тяги с большим ресурсом и др.

Реализованы в параллельных вычислительных алгоритмах усовершенствованные квантово-статистические модели описания поведения высокотемпературной плазмы. На основе этих моделей разработаны алгоритмы для вычисления спектральных коэффициентов поглощения фотонов, росселандовых пробегов и уравнения состояния, необходимые для проведения сложных расчетов, описывающих газодинамические и тепловые процессы при воздействии мощного излучения на вещество. При этом решение систем нелинейных уравнений, требующие больших вычислительных затрат, осуществляется с широким распараллеливанием по спектральным переменным, что позволяет проводить детальные расчеты с учетом тонкой структуры энергетических уровней.

Заметное место в задачах вычислительной физики занимает изучение процессов генерации, распространения и воздействия на объекты и внутреннюю аппаратуру *электромагнитного излучения* от импульсных ионизирующих источников. Решение этих многомерных задач осуществляется на основе адаптации для параллельных вычислений самосогласованного описания процесса генерации электромагнитных полей на основе нестационарных уравнений Максвелла и кинетики электронов в формирующихся полях. Распараллеливание производится по геометрической компоненте. В обработке использовалось до 200 процессоров системы МВС-1000М.

Исследование процессов *переноса радиационного излучения* необходимо в целом ряде задач, в том числе в инженерных и астрофизических приложениях. Суммарная пространственная сетка в большинстве расчетов по всем подобластям составляла  $1.8 \cdot 10^8$  точек. Практические расчеты проводились, в основном, на 513 процессорах системы МВС-1000М с эффективностью распараллеливания более 70%. Время расчета одного практического варианта составило около 600 мин.

Пространственный шаг сетки для реальных задач — от  $1 \div 2$  мм (при общих размерах  $\sim 10$  м), что позволяет описать геометрию реального устройства практически без искажений.

К задачам *компьютерной биологии* относятся:

- Распознавание кодирующих участков в первичной структуре биополимеров; сравнительный анализ первичных структур биополимеров.
- Расшифровки пространственной структуры биополимеров и их комплексов.
- Пространственное сворачивание белков.
- Моделирование структуры и динамики биомакромолекул.

Уже получены важные результаты, в том числе при анализе генетической информации, расшифровке пространственной структуры биомакромолекул, моделировании механизмов их функционирования. Принципиально новым в предложенном подходе является моделирование не только структурообразования как отдельного явления, но и процесса рождения макромолекулы в целом. Это включает в себя моделирование механизма возникновения и роста молекулярной цепи.

Задачи компьютерной биологии и особенно структурообразования весьма объемны и поддаются эффективному распараллеливанию. Можно показать, что вычислительная сложность моделирования процесса структурообразования вторичных структур РНК имеет кубический рост в зависимости от длины молекулы. При этом квадратичный рост приходится на вычисление свободной энергии переходов от текущей структуры к потенциально возможным перестроенным структурам. Сами расчеты энергии структурных переходов могут вестись независимо друг от друга. С увеличением длины молекулярной цепи повышается объем вычислений по отношению к межпроцессорным обменам, что способствует эффективности распараллеливания обработки.

Сотрудники кафедры «Вычислительная механика» принимают активное участие в решении перечисленных задач. На основе приобретенного опыта созрела убежденность в необходимости и реальности дальнейшего продвижения в высокопроизводительных вычислениях. Для успешного решения этих задач большое значение имеет подготовка квалифицированных специалистов. Многие спецкурсы, которые читаются сотрудниками кафедры, посвящены вопросам создания математических моделей для решения сложных задач механики и эффективной их реализации на многопроцессорных вычислительных системах.