

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ,
ИНСТИТУТ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ
МЕТОДЫ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Часть 2

СБОРНИК ТРУДОВ

21–23 апреля 2015 г., Россия, Таруса

Под редакцией
Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура

Серия «Механика, управление и информатика»

МОСКВА
ИКИ РАН
2015

Вычислительные технологии в естественных науках.

Методы суперкомпьютерного моделирования

Часть 2

Сборник трудов

Россия, Таруса, 21–23 апреля 2015 г. Под редакцией Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура

Статьи, вошедшие в настоящий сборник, основаны на докладах, представленных на расширенном семинаре «Методы суперкомпьютерного моделирования», который проходил 21–23 апреля 2015 г. в г. Таруса на базе гостиницы «Интеркосмос» Государственного бюджетного учреждения науки Института космических исследований РАН (ИКИ РАН). Это очередной семинар из серии расширенных семинаров, посвящённых вычислительным технологиям в естественных науках. На первом семинаре рассматривались вопросы компьютерного моделирования актуальных задач физики и механики, его труды изданы в 2009 г. в выпуске 1 (Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вып. 1. Вычислительная физика / Под ред. Р.Р. Назирова. М.: КДУ, 2009. 288 с.); второй семинар был посвящён обсуждению физических и медицинских аспектов исследования сложных нелинейных физических процессов в организме человека (Методы нелинейного анализа в кардиологии и онкологии: Физические подходы и клиническая практика. Вып. 2 / Под ред. Р.Р. Назирова. М.: КДУ, 2010. 206 с.); на третьем семинаре обсуждались проблемы компьютерного моделирования задач биологии и химии (Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вып. 3. Вычислительная химия и биология / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М.: КДУ, 2010. 118 с.); на четвёртом — проблемы технического зрения (Техническое зрение в системах управления мобильными объектами-2010: Труды научно-технической конференции-семинара. Вып. 4. / Под ред. Р.Р. Назирова. М.: КДУ, 2011, 328 с.). На четвертом семинаре обсуждались вопросы моделирования событий глобальных масштабов (Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Системы глобального масштаба / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2011, 148 с.). Пятый семинар был посвящён теме исследований в области перспективных компьютерных систем, с акцентом на обсуждение концептуальных подходов, разработке новых методов и устройств (Труды семинара Вычислительные технологии в естественных науках. Перспективные компьютерные системы: устройства, методы и концепции. / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2011, 192 с.). На шестом семинаре были обсуждены алгоритмы и методы в области вычислительной физики, причем особый акцент делался на обсуждении полученных новых физических результатов. Материалы этого семинара можно найти на страницах семинара <http://www.iki.rssi.ru/seminar/>. Седьмой семинар получил название «Инфокоммуникационные технологии в научных исследованиях» и его материалы были изданы в двойном номере журнала «Информационное общество» (выпуски 1–2, 2013). Восьмой семинар, как и нынешний, получил название «Методы суперкомпьютерного моделирования». Это связано с тем, проведение семинаров с такой тематикой поддержано в рамках выполнения научных исследований по гранту РНФ 14-21-00158 «Разработка алгоритмов и методов для задач математического моделирования на суперкомпьютерных системах, включая гибридные» Важная особенность расширенных семинаров состоит в привлечении молодежи к активному участию в качестве докладчиков. Как правило, более половины докладов делаются молодыми исследователями.

Ключевые слова: математическое моделирование, гибридные компьютерные системы, моделирование на суперкомпьютерах, методы и алгоритмы параллельных вычислений.

Редактор:

Компьютерная верстка: *Титова А.Ю.*

Дизайн обложки: *Захаров А.Н.*

Электронная версия сборника размещена на сайте ИКИ РАН <http://www.iki.rssi.ru/print.htm>.

Отдельные материалы даны в авторской редакции.

ВВЕДЕНИЕ МЕТОДЫ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»

Читателю предлагаются избранные статьи, написанные на основе приглашенных докладов на очередном 9-м расширенном семинаре по вычислительным методам в естествознании. Под названием «Методы суперкомпьютерного моделирования» семинар был проведен 21–23 апреля 2015 года на базе «Интеркосмос» Института космических исследований Российской академии наук. Как и предыдущий, семинар был посвящен методам и практике разработки и применения методов моделирования на суперкомпьютерах для решения задач в различных областях естественных наук, а также вопросам применения новых информационных и телекоммуникационных технологий при проведении исследований в области естественных наук. Особое внимание было уделено новым разработкам, идеям и методам, а также ярким результатам, добиться которых без применения современных методов проведения моделирования и без использования новых информационных и телекоммуникационных технологий было бы затруднительно или невозможно.

Особенность проводимых нами научных семинаров [1–8] состоит в активном участии молодых научных сотрудников и аспирантов, число которых составляет примерно половину участников. Другая особенность проводимых нами расширенных семинаров состоит в том, что в их рамках проводились научно-учебные семинары с приглашенными студентами, которые делают первые шаги в научных исследованиях по тематике семинара. Еще одна особенность семинаров, начиная с восьмого, состоит в том, что их проведение поддержано грантом РНФ 14-21-00158 «Разработка алгоритмов и методов для задач математического моделирования на суперкомпьютерных системах, включая гибридные» (руководитель Щур Л.Н.)

На семинаре был представлен 21 устный доклад и 5 стендовых докладов.

Сотрудник Института космических исследований РАН (г. Москва) Моисеенко Сергей Григорьевич представил доклад «Моделирование коллапса холодного быстровращающегося протозвездного облака» [9]. Плотность облака меняется на много порядков, что потребовало использования особой реализации разностной схемы. Применялась полностью консервативная неявная операторно-разностная схема в Лагранжевых координатах и треугольная сетка переменной структуры.

Были исследованы нестационарные магниторотационные процессы в замагниченном облаке. Этот результат получен в развитие доложенной на предыдущем семинаре работы [32].

Доклад Рыбакина Виктора Петровича [10], сотрудника МГУ им. М.В. Ломоносова (г. Москва), был посвящен моделированию трехмерных газодинамических задач на многопроцессорных гибридных компьютерах.

Кураченко Анатолий Викторович представил работу группы сотрудников научно-исследовательского центра «Журчатовский институт», в которой изложен развиваемый группой подход по применению облачных систем для решения задач секвенирования [11].

Два доклада были посвящены другой актуальной теме – эффективности обработки сейсмических данных и моделированию процессов сейсмологии. Это работа коллектива Казанского государственного университета (г. Казань), которую представил Биряльцев Евгений Васильевич [12] и работа коллектива Московского физико-технического института (г. Долгопрудный), которую представил Хохлов Николай Игоревич [13].

Пашков Денис Витальевич (Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», г. Москва) изложил подход по синтезу алгоритмов построения доверенных информационных систем [14].

Первый день работы конференции завершился традиционным докладом-ужином, который представил тандем из Санкт-Петербургского университета, Богданов Александр Владимирович и Дягтярев Александр Борисович. В докладе «Суперкомпьютерные технологии без суперкомпьютеров: какие задачи мы можем, а какие пока не можем решить» [15] был изложен взгляд на проблему решения задач, требующих большого объема вычислений, с историческим дискурсом и изложением личного опыта. Этот доклад был особо интересен молодым исследователям, поскольку некоторые изложенные докладчиками истории произошли задолго до рождения молодых слушателей.

С практического решения ряда затронутых в докладе-ужине проблем началась утренняя сессия. В докладе руководителя старейшего в России факультета вычислительной математики и кибернетики (Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород) Гергеля Виктора Павловича была изложена методика решения задач глобальной оптимизации, которая имеет перспективы использования на компьютерах следующего десятилетия [16].

Козелков Андрей Сергеевич (Российский федеральный ядерный центр ВНИИЭФ, г. Саров) представил работу коллектива известного ядерного исследовательского центра по разработке программного обеспечения для решения индустриальных задач, требующих гигантских объемов вычисления с применением моделирования гидродинамических процессов [17].

Коллектив исследователей Ярославского государственного университета им. П.Г. Демидова, состоящий как из маститых ученых, так и юных исследователей, поделился успехами в численном исследовании задач, имеющих как чисто

теоретическое, так и сугубо практическое значение. Руководитель коллектива Глызин Сергей Дмитриевич изложил разрабатываемый им подход к исследованию неклассических релаксационных колебаний, возникающих в небесной механике [18].

Доклады его молодых коллег, Алешина Сергея Владимировича [19] и Фролова Даниила Александровича [20], были посвящены исследованию поведения динамических систем с запаздыванием и автоматизации моделирования задач диффузии на гибридных вычислительных системах.

В докладах следующей сессии речь шла о задачах пограничных течений жидкости. Гайдуков Роман Константинович (Высшая школа экономики, г. Москва) исследовал задачу течения вблизи поверхности с неровностями [21].

Дружинин Олег Александрович (Институт прикладной физики РАН, г. Нижний Новгород) изложил исследование важной практической задачи численного моделирования мелкомасштабной турбулентности и внутренних волн в жидкости [22].

Развитию численных методов решения задач была посвящена секция. В докладе Бараша Льва Юрьевича [23] (Научный центр РАН в Черноголовке и ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, г. Черноголовка) был изложен новый метод исследования задач релаксации спиновых моделей и его реализация на гибридных вычислительных системах.

В докладе Теслюка Антона Борисовича [24] (НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва) обсуждались проблемы анализу и моделированию экспериментальных данных по расшифровке структуры макромолекул за счет рассеяния лазерного излучения. Эта работа является подготовкой к анализу данных со строящейся экспериментальной установки.

На вечерней сессии молодыми исследователями было представлено пять стендовых докладов:

В.П. Гергель, М.В. Денисенко, А.В.Линев, Д.С.Пашин (докладчик), А.М. Сатанин (Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород) «Квантовые траектории и томография состояний связанной системы кубит-измерительный осциллятор» [25].

Сиднев А.А., (Нижегородский государственный университет, г. Нижний Новгород) «Макромодульный подход по разработке сложного программного обеспечения».

Ивановский Л.И., Самсонов С.О. (Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, г. Ярославль) «Фазовые перестройки одной двумерной динамической системы с импульсным воздействием» [26].

Досаев А.С. (Институт прикладной физики РАН, г. Нижний Новгород) «Численное моделирование динамики нелинейных гравитационных волн на глубокой воде» [27].

Зиганурова Л.Ф., (Высшая школа экономики, Москва) «Моделирование профиля времен в локальном консервативном алгоритме ПМДС».

Третий день конференции продолжился представлением исследования широкого спектра задач.

Три доклада были посвящены исследованию свойств потенциальных устройств для квантовых вычислений. Молодой сотрудник Муняев Вячеслав Олегович (Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород) изложил исследование динамики джозефсоновского осциллятора [28], а его научный руководитель Сатанин Аркадий Михайлович представил результаты оригинальных исследований генерации перепутанных состояний в волноводе с таким осциллятором [29]. Коллективом из Института прикладной физики (г. Нижний Новгород) было разработано программное обеспечение для исследования таких задач с использованием гибридных ЭВМ [30].

Анализ масштабируемости параллельных приложений на основе технологий суперкомпьютерного кодизайна был темой доклада сотрудника МГУ им. М.В. Ломоносова (г. Москва) Теплова Алексея Михайловича.

Завершающий доклад об использовании новых командных расширений процессоров Intel для повышения эффективности генерации псевдослучайных чисел сделала студентка 3-го курса Московского института электроники и математики Гуськова Мария Сергеевна.

С полными мультимедийными версиями докладов можно ознакомиться на странице семинара [33].

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Выпуск 1. Вычислительная физика / Под ред. Р.Р. Назирова. М.: КДУ, 2009.
- [2] Методы нелинейного анализа в кардиологии и онкологии: Физические подходы и клиническая практика. Вып.2 / под ред. Р.Р. Назирова. М. КДУ, 2010
- [3] Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Выпуск 3. Вычислительная химия и биология / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М.: КДУ, 2010.
- [4] Техническое зрение в системах управления мобильными объектами, 2010: Труды научно-технической конференции-семинара. Вып. 4. / Под ред. Р.Р. Назирова. М. : КДУ, 2011. 328 с.
- [5] Вычислительные технологии в естественных науках. Системы глобального масштаба. Труды семинара / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М.: КДУ, 2011.
- [6] Вычислительные технологии в естественных науках. Перспективные компьютерные системы: устройства, методы и концепции. Труды семинара / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2011.
- [7] Инфокоммуникационные технологии к научным исследованиям. Информационное общество. № 1-2, 2013.
- [8] Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Труды семинара / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М: ИКИ РАН, 2014.
- [9] *Моисеенко С.Г., Бисноватый-Коган Г.С., Арделян Н.В., Космачевский К.В.* «Моделирование коллапса холодного быстровращающегося протозвездного облака». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерно-

- го моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 151-174/ Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [10] *Рыбакин Б.П.* «Моделирование 3D задач нестационарной газодинамики на многопроцессорных ЭВМ и графических ускорителях». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 175-183 / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [11] *Кураченко А.В., Ильин В., Пойда А., Теслик А., Недолужко А.* «Облачные системы для анализа данных секвенирования».
- [12] *Биряльцев Е.В.* «Новые методы сейсморазведки на основе высокопроизводительных вычислений».
- [13] *Петров И.Б., Хохлов Н.И.* «Применение современных высокопроизводительных технологий для моделирования задач сейсмологии и геофизики».
- [14] *Белов А.В., Пашков Д.В.* «Синтез алгоритмов построения доверенных информационных систем с трехзвенной архитектурой». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 43-60 / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [15] *Богданов А.В., Дегтярев А.Б.* «Суперкомпьютинг без суперкомпьютеров: что мы можем, а чего не можем?». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 61-77 / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [16] *Гергель В.П., Баркалов К.А.* «Достижение эксафлопсной производительности в задачах глобальной оптимизации». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 78-85 / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [17] *Козелков А.С., Шагалиев Р.М., Курулин В.В., Ялозо А.В., Лашкин С.В.* «Проблемы использования суперкомпьютеров для масштабируемого численного моделирования задач гидродинамики в промышленных приложениях». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 133-150 / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [18] *Глызин С.Д.* «О неклассических релаксационных колебаниях в сингулярно возмущенных динамических системах».
- [19] *Алешин С.В., Глызин С.Д.* «Пространственно неоднородные решения уравнения Колмогорова-Петровского-Пискунова с запаздыванием». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 11-17/ Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [20] *Глызин Д.С., Фролов Д.А.* «Автоматизация конечно-разностного моделирования диффузионных задач на гибридных вычислительных кластерах».
- [21] *Данилов В.Г., Гайдуков Р.К.* «Течения в пограничных слоях вдоль поверхностей с малыми неровностями».
- [22] *Дружинин О.А., Островский Л.А., Фэнь Ж.* «Прямое численное моделирование взаимодействия мелкомасштабной турбулентности с внутренними волнами». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 110-120/ Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.

- [23] *Бараиш Л.Ю., Щур Л.Н., Боровский М.* Алгоритм «Population Annealing» и его применение к двумерной модели Изинга». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 29-42/ Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [24] *Теслюк А.Б., Бобков С.А., Ильин В.А.* НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, «Моделирование и обработка данных для экспериментов по рассеянию излучения лазеров на свободных электронах на макромолекулярных объектах».
- [25] *Гергель В.П., Денисенко М.В., Линева А.В., Пашин Д.С., Сатанин А.М.* «Квантовые траектории и томография состояний связанной системы кубит-измерительный осциллятор». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 86-99/ Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [26] *Ивановский Л.И., Самсонов С.О.* «Динамика одного двумерного отображения и устойчивые режимы сингулярно возмущенной системы нейронного типа». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 121-132/ Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [27] *Досаев А.С., Троицкая Ю.И.* «Численное моделирование динамики нелинейных волн на глубокой воде». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 100-109/ Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [28] *Денисенко М.В., Муляев В.О., Сатанин А.М.* «Генерация перепутанных (entangled) состояний фотонов в волноводной линии с встроенным джозефсоновским осциллятором».
- [29] *Мартынов В.О., Миронов В.А., Смирнов Л.А.* «Численное моделирование диссипативной динамики многочастичных открытых квантовых систем с использованием технологий вычисления на GPU».
- [30] *Антонов А.С., Теплов А.М.* «Анализ масштабируемости параллельных приложений на основе технологий суперкомпьютерного кодизайна». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2. Сборник трудов, стр. 18-28/ Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2015.
- [31] *Гуськова М.С.* «AVX2 и эффективная генерация псевдослучайных чисел».
- [32] *Моисеенко С.Г., Бисноватый-Коган Г.С.* «Моделирование коллапса холодного быстроевращающегося протозвездного облака». Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Сборник трудов, стр. 121-135/ Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М. – М: ИКИ РАН, 2014.
- [33] Мультимедийные версии докладов. URL: <http://iki.rssi.ru/seminar/2015042123/>

ОРГАНИЗАТОРЫ СЕМИНАРА

Назирова Р.Р.,

д.т.н., профессор

Институт космических исследований РАН

Щур Л.Н.,

д.ф.-м.н., профессор

Научный центр РАН в Черноголовке