

научно-практический семинар

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

*ТЕХНОЛОГИИ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО  
ПРОГРАММИРОВАНИЯ –  
СВОБОДА ТВОРЧЕСТВА ИЛИ ЖЕСТКИЕ  
РАМКИ ПРАВИЛ?*

Вл.В.Воеводин  
НИВЦ МГУ

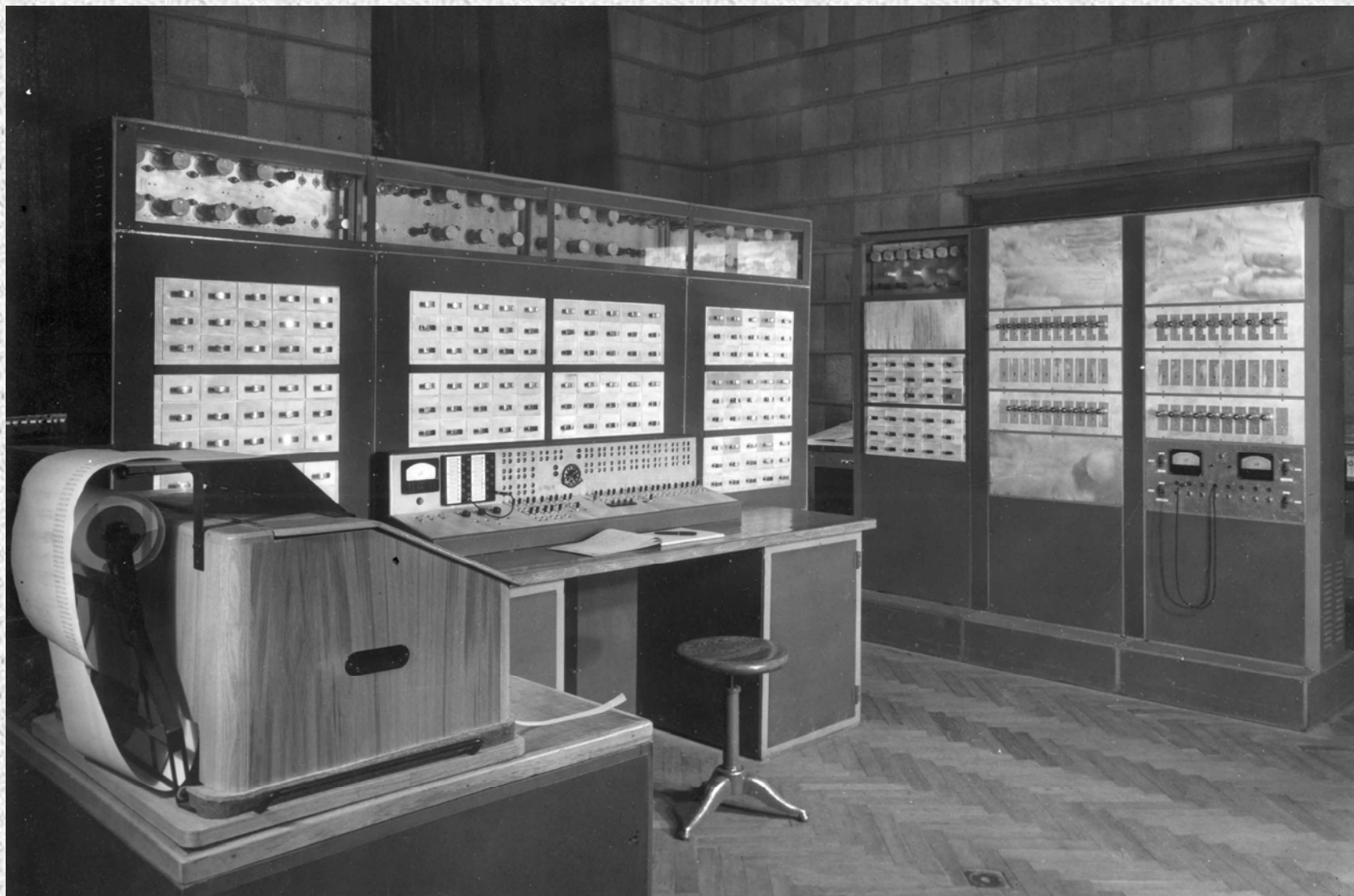
voevodin@parallel.ru

Челябинск, ЮУрГУ, 26 января 2006г.

# *НИВЦ МГУ – этапы развития*



# НИВЦ МГУ – этапы развития





# *НИВЦ МГУ – этапы развития*





- *Кластер SCI, 2000 г., 36 CPUs, 18 Gflops*
- *Кластер AQUA, 2002 г., 88 CPUs, 82 Gflops*
- *Кластер LEO, 2003 г., 32 CPUs, 166 Gflops*
- *Кластер ANT, 2004 г., 160 CPUs, 704 Gflops*

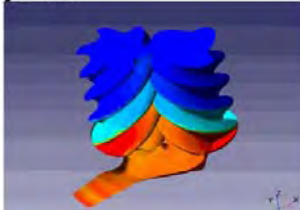


## FlowVision

### Гидравлические системы

Проектирование шестеренчатых насосов

- Определение температуры на выходе
- Расчёт расхода
- Учёт утечек



Проект:  
моделирование  
винтового насоса

## FlowVision

### Атомная энергетика

Тепло-массоперенос в блоке ядерного реактора

- Циркуляция теплоносителя



# А НАМ ЭТО НАДО?

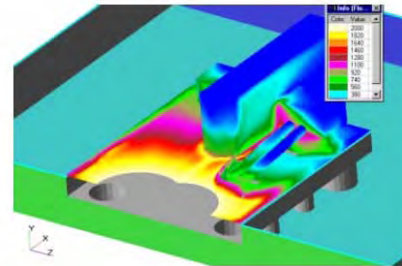
Решение  
температур  
ядерного реактора

## FlowVision

### Аэрокосмическая

Ракетно-космическая промышленность

- Сверхзвуковое течение воздуха около ракеты
- Течение газа в ракетном двигателе
- Моделирование воздействия реактивной струи на стартовый комплекс



Проект: НПО Энергия,  
моделирование  
тепловой нагрузки на  
сооружения при  
морском старте

### Металлургия

Литье в форму

- Заполнение формы жидким металлом
- Процесс затвердевание металла



Заполнение формы (моделирование)

# *Схема решения задачи на компьютере*

Предметная сторона

Задача

Компьютерная сторона

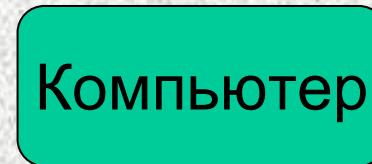
Компьютер

# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона



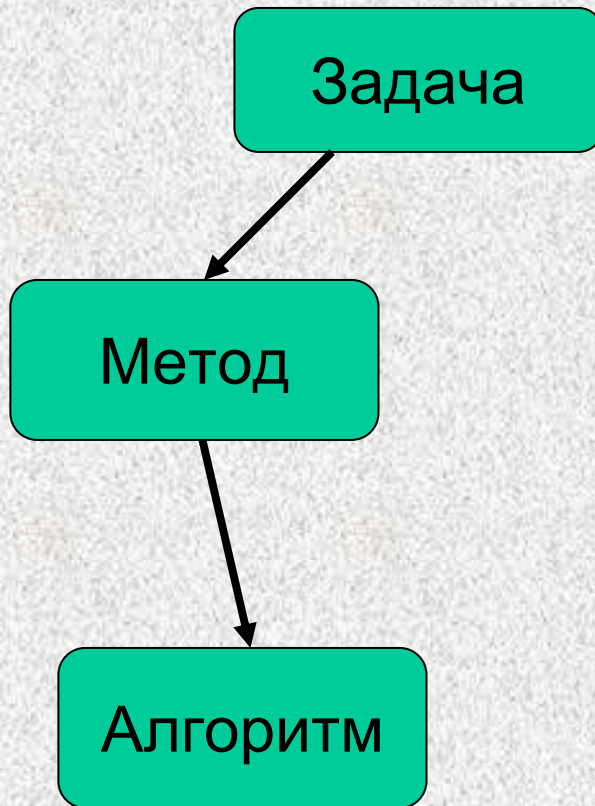
Компьютерная сторона





# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона



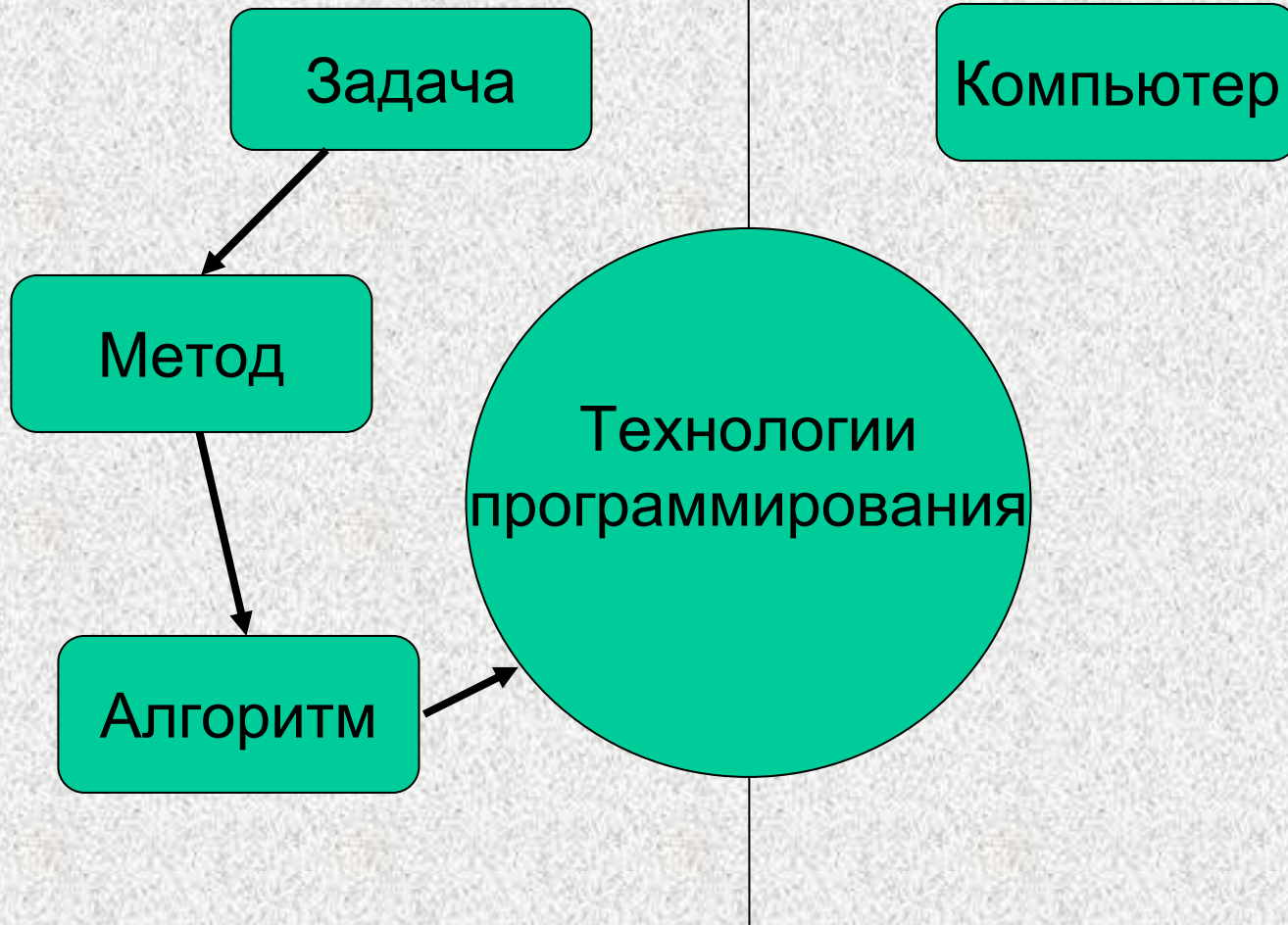
Компьютерная сторона



# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона

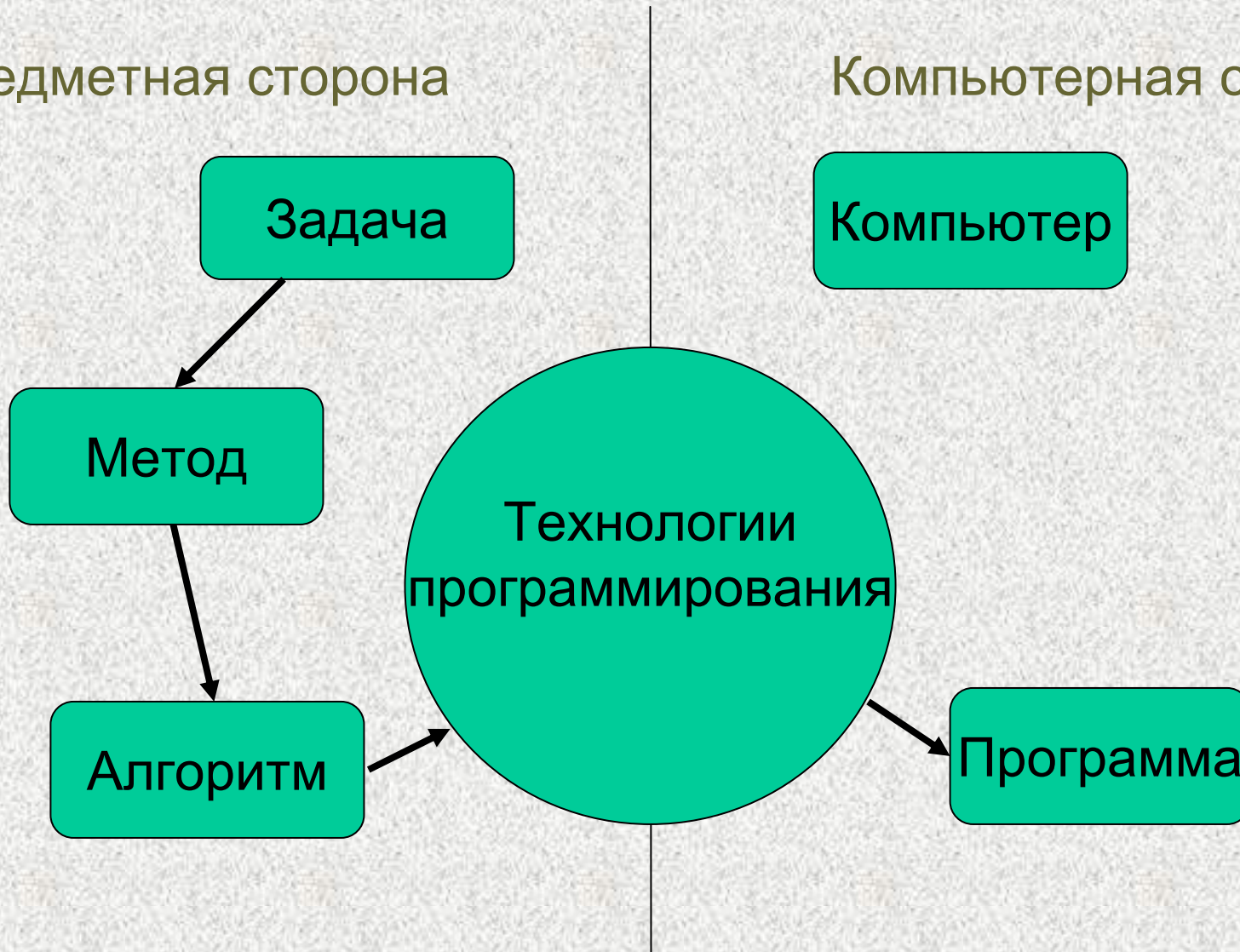
Компьютерная сторона



# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона

Компьютерная сторона

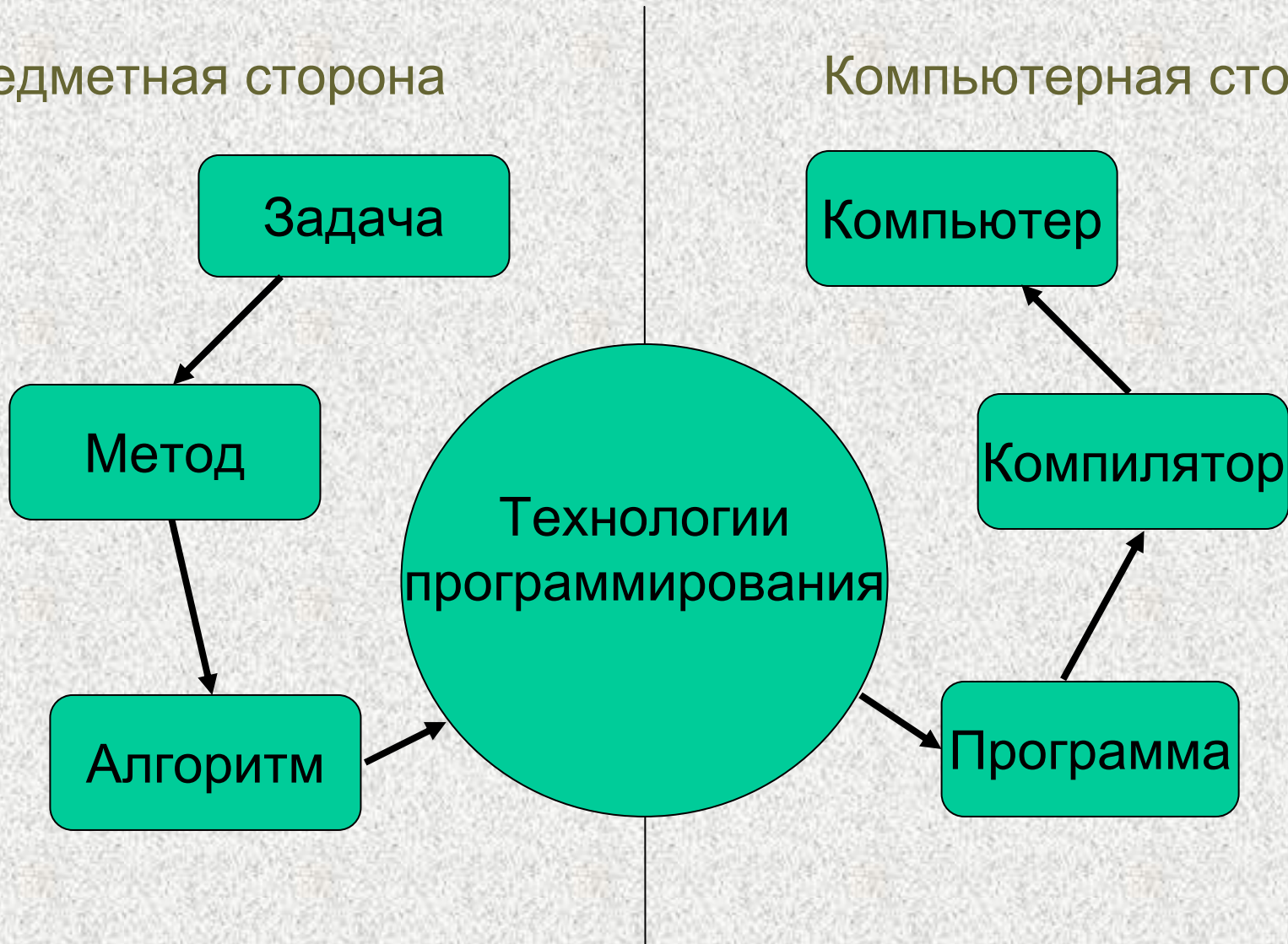




# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона

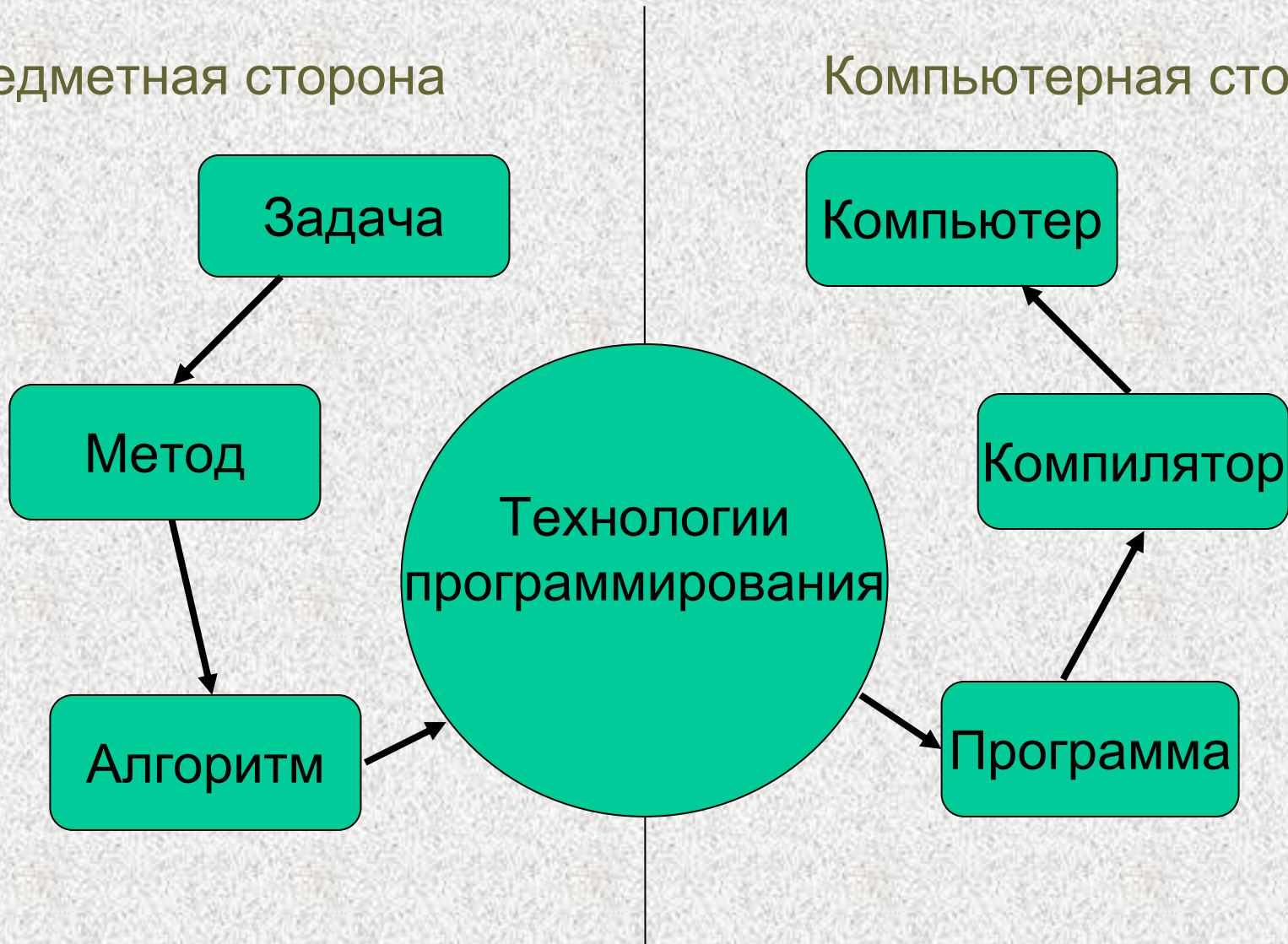
Компьютерная сторона



# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона

Компьютерная сторона



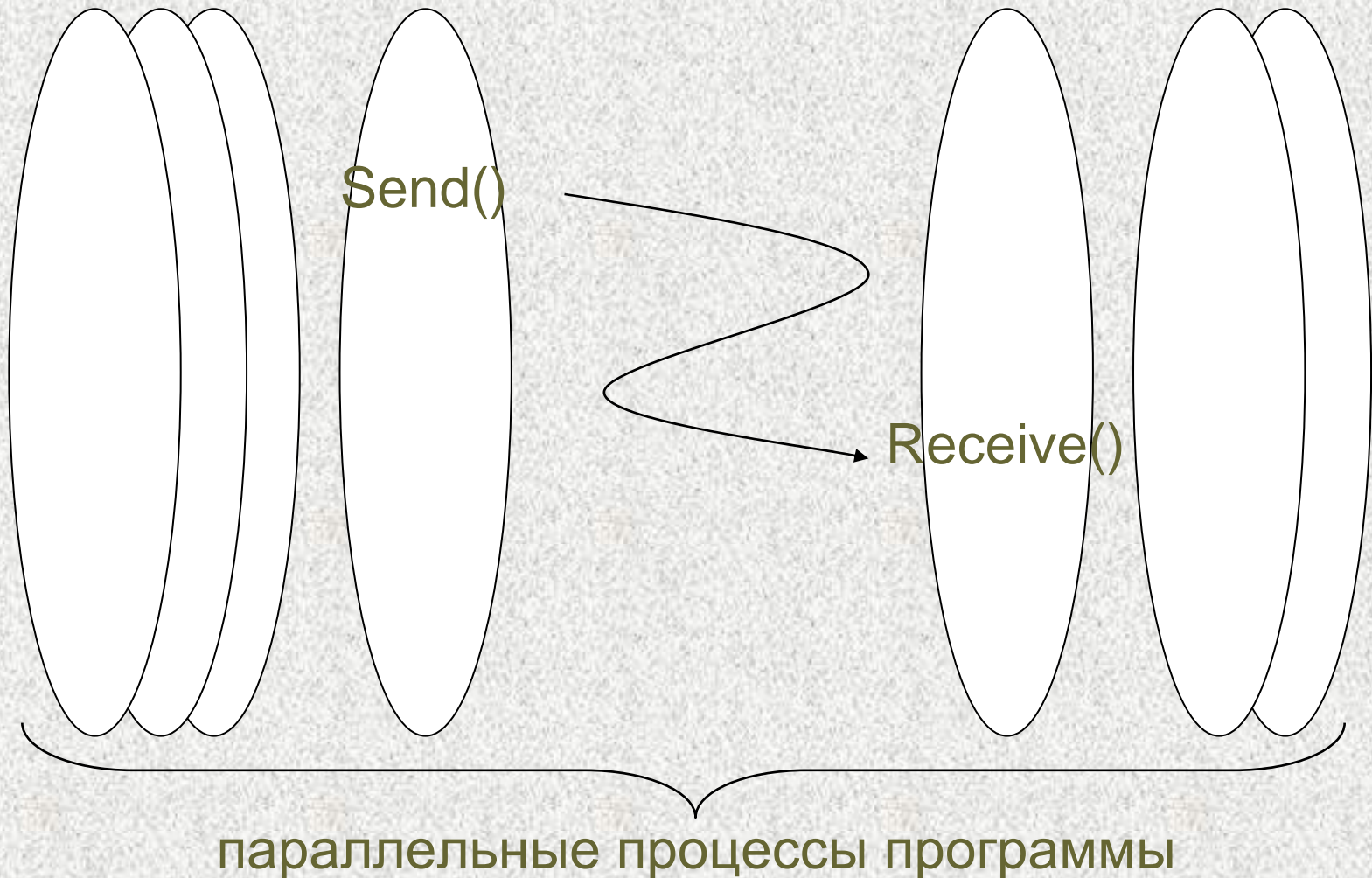
# ЧТО ТАКОЕ “МОДЕЛЬ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ”?

*SPMD ?    Master / Slaves ?*

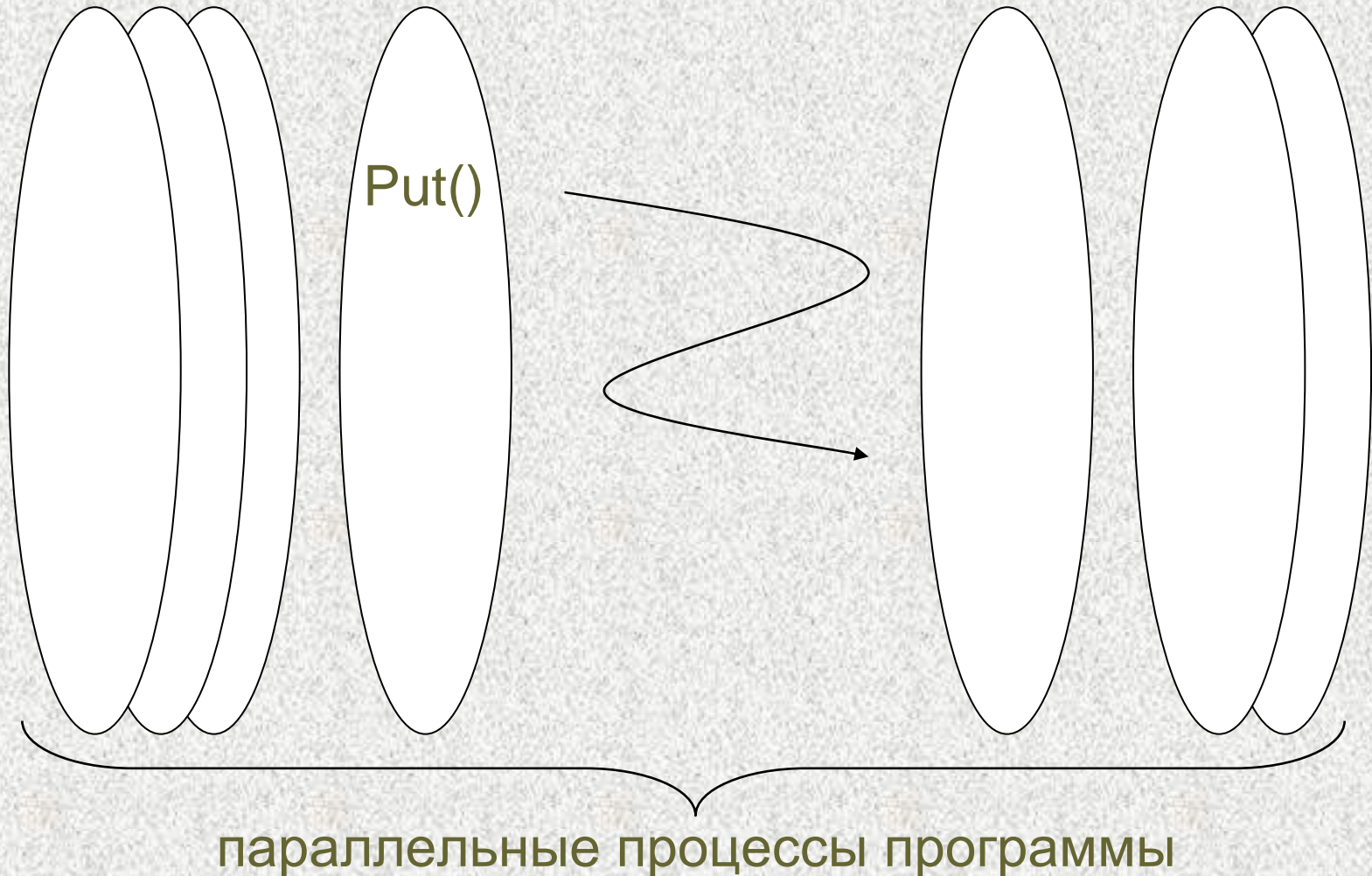
*Как должен пользователь представлять себе параллельную программу и процесс ее функционирования в вычислительной среде?*



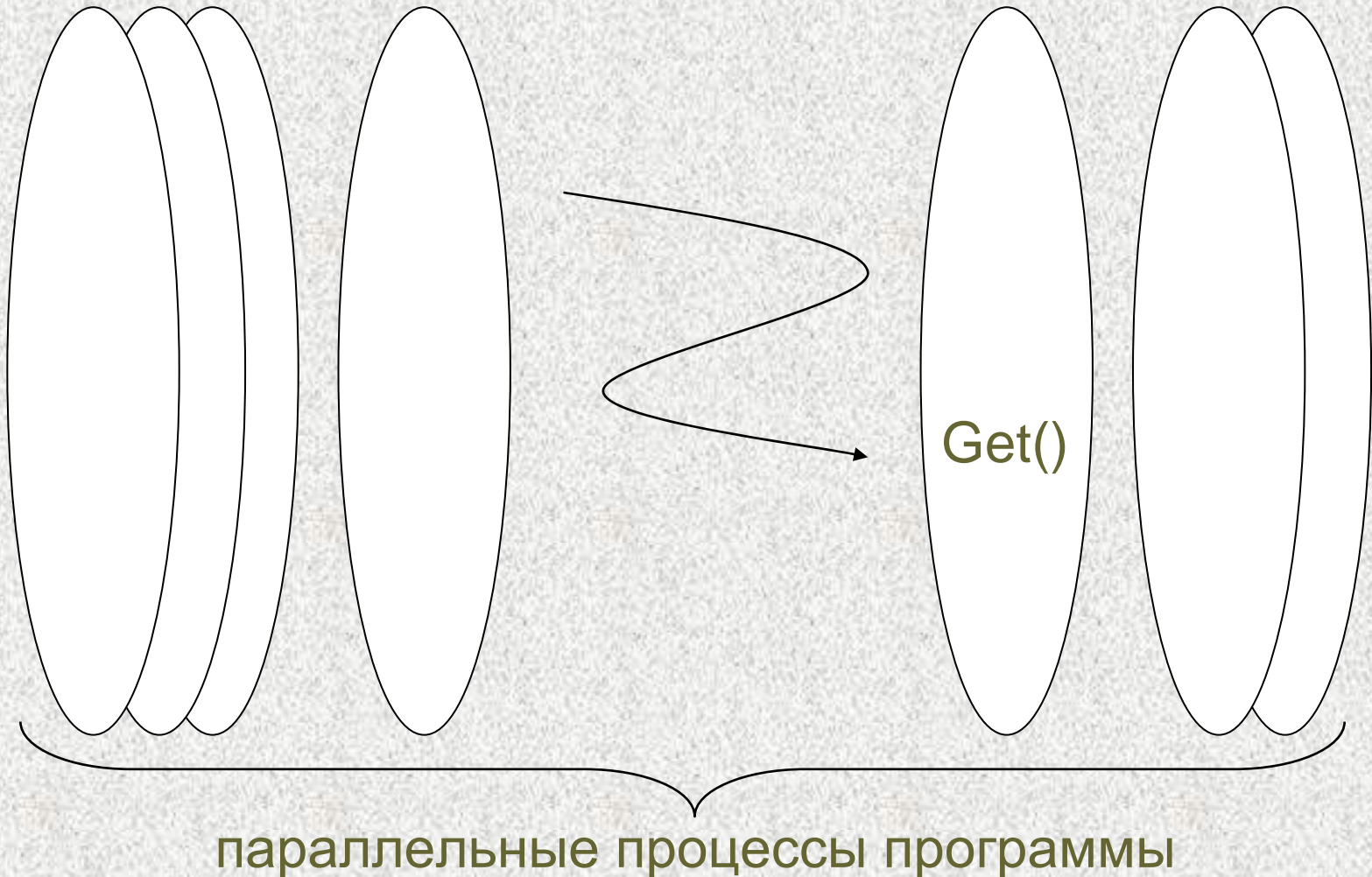
# Модели систем с передачей сообщений



# Модели систем с передачей сообщений



# Модели систем с передачей сообщений

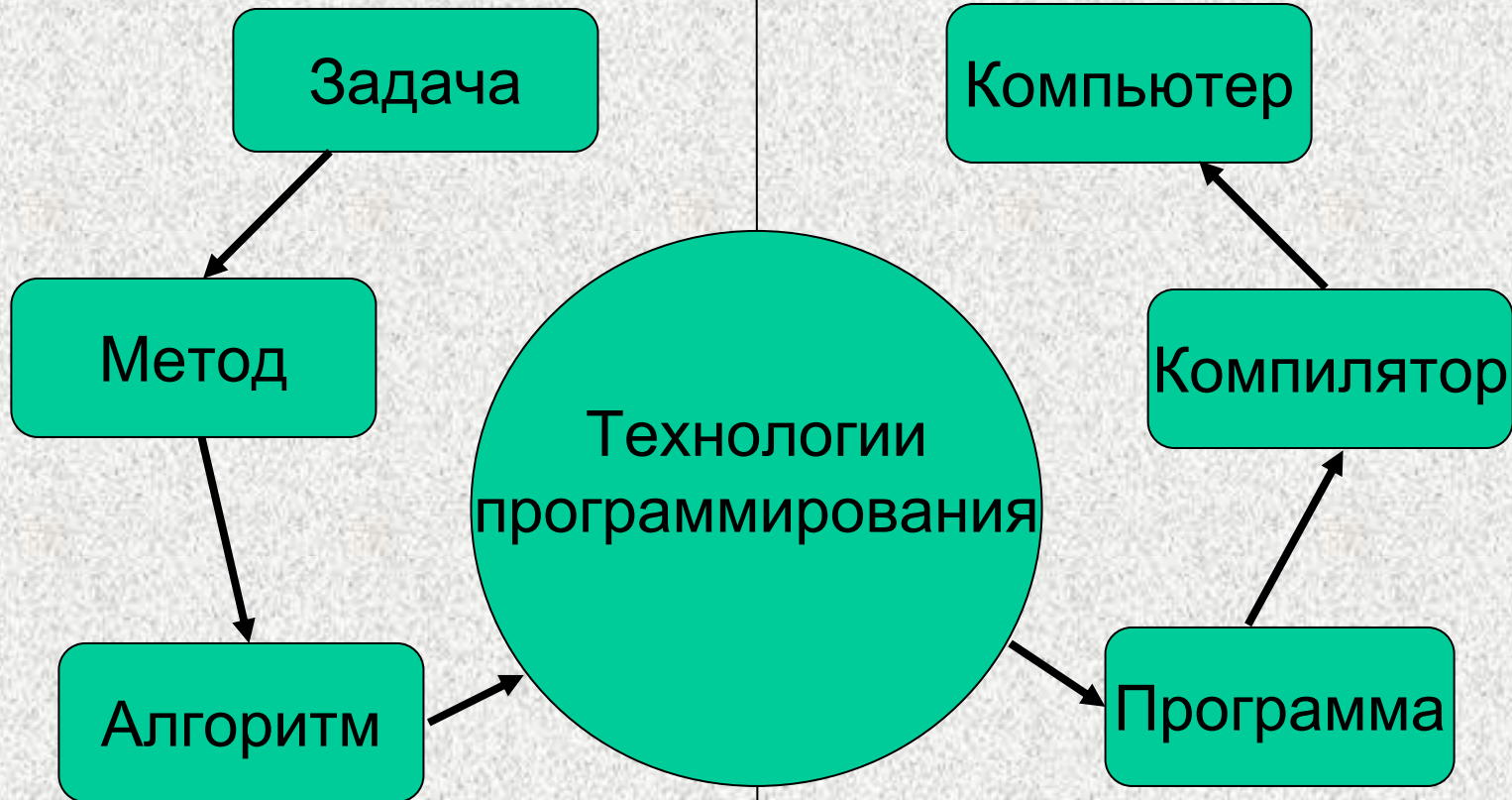




# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона

Компьютерная сторона



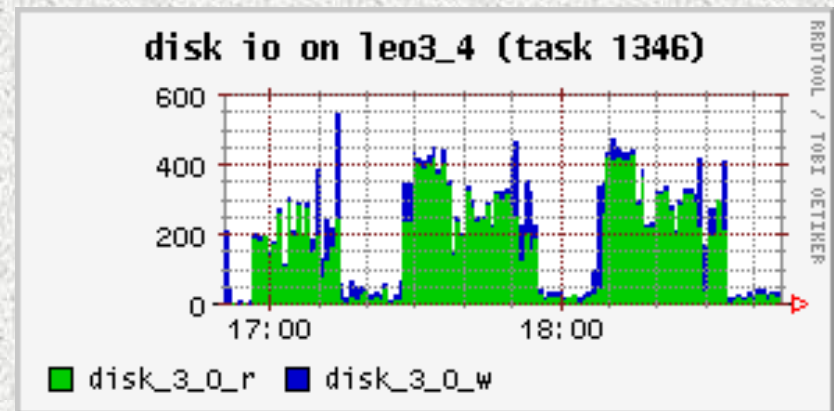
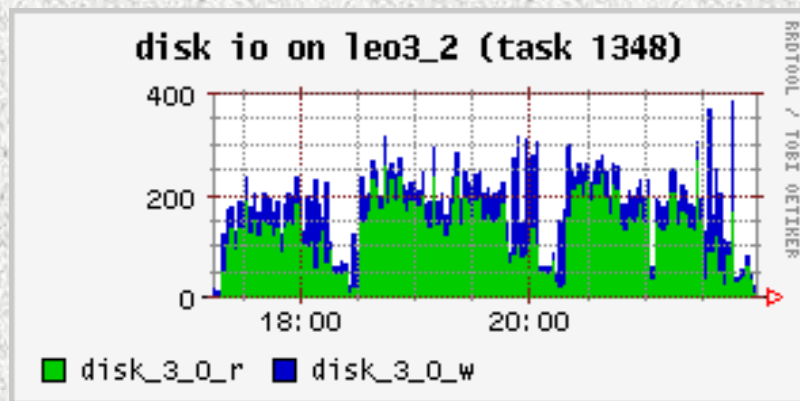
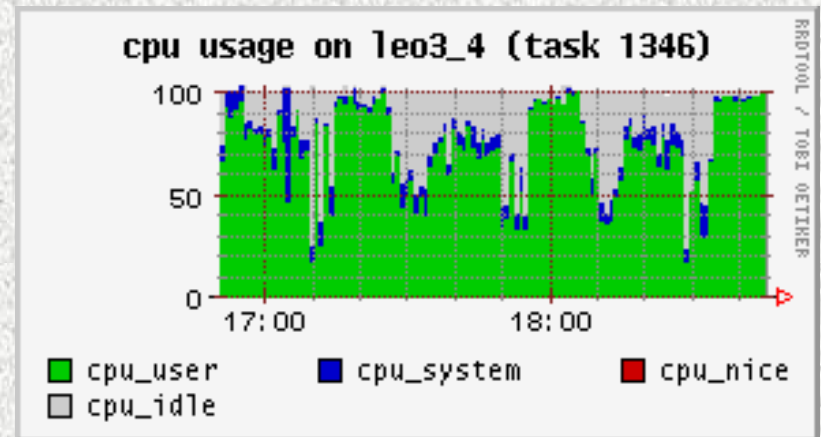
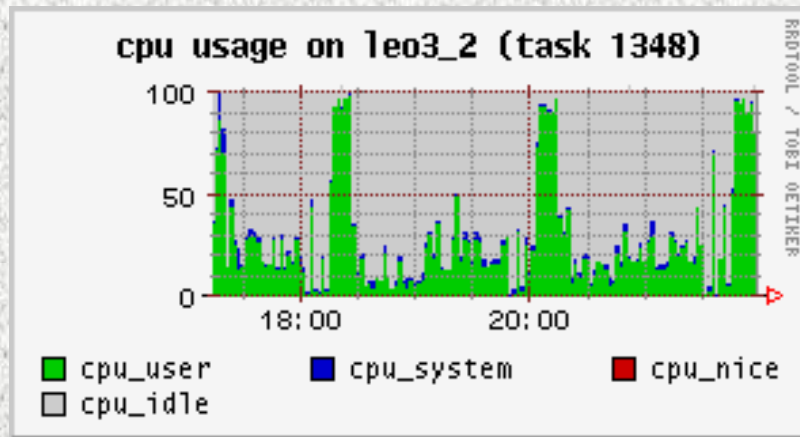
# FTRACE

```
*-----*
FLOW TRACE ANALYSIS LIST
*-----*
```

```
Execution : Mon Oct 1 14:35:44 2001
Total CPU : 0:24'23"310
```

PROG.UNIT	FREQUENCY	EXCLUSIVE TIME[sec] ( % )	AVER.TIME [msec]	MOPS	MFLOPS	V.OP RATIO	AVER. V.LEN	I-CACHE MISS	O-CACHE MISS	BANK CONF
fftstp	267320	370.925( 25.3)	1.388	3000.0	1415.9	99.79	236.2	2.7656	0.1548	27.1826
rnlsml	257	127.502( 8.7)	496.115	857.4	556.6	96.78	22.6	0.0997	5.9927	0.3356
fftpr	87134	113.965( 7.8)	1.308	2568.6	1022.0	99.77	236.1	0.5757	0.0648	8.9074
rgs	141	105.748( 7.2)	749.987	2474.7	1605.9	98.54	126.5	0.0635	1.6755	0.0007
ovlap	142	87.397( 6.0)	615.475	2976.2	1960.4	99.54	165.5	0.0967	0.0139	0.4219
rotate	141	85.517( 5.8)	606.506	3044.1	1981.6	99.70	255.3	0.1488	0.0096	0.0000
...										
...										
...										
my_task_query	1	0.000( 0.0)	0.001	19.7	0.0	0.00	0.0	0.0000	0.0000	0.0000
-----										
total	16500513	1463.310(100.0)	0.089	2178.4	1030.4	99.13	160.3	20.9125	20.2773	61.8420

# Сертификация параллельных программ

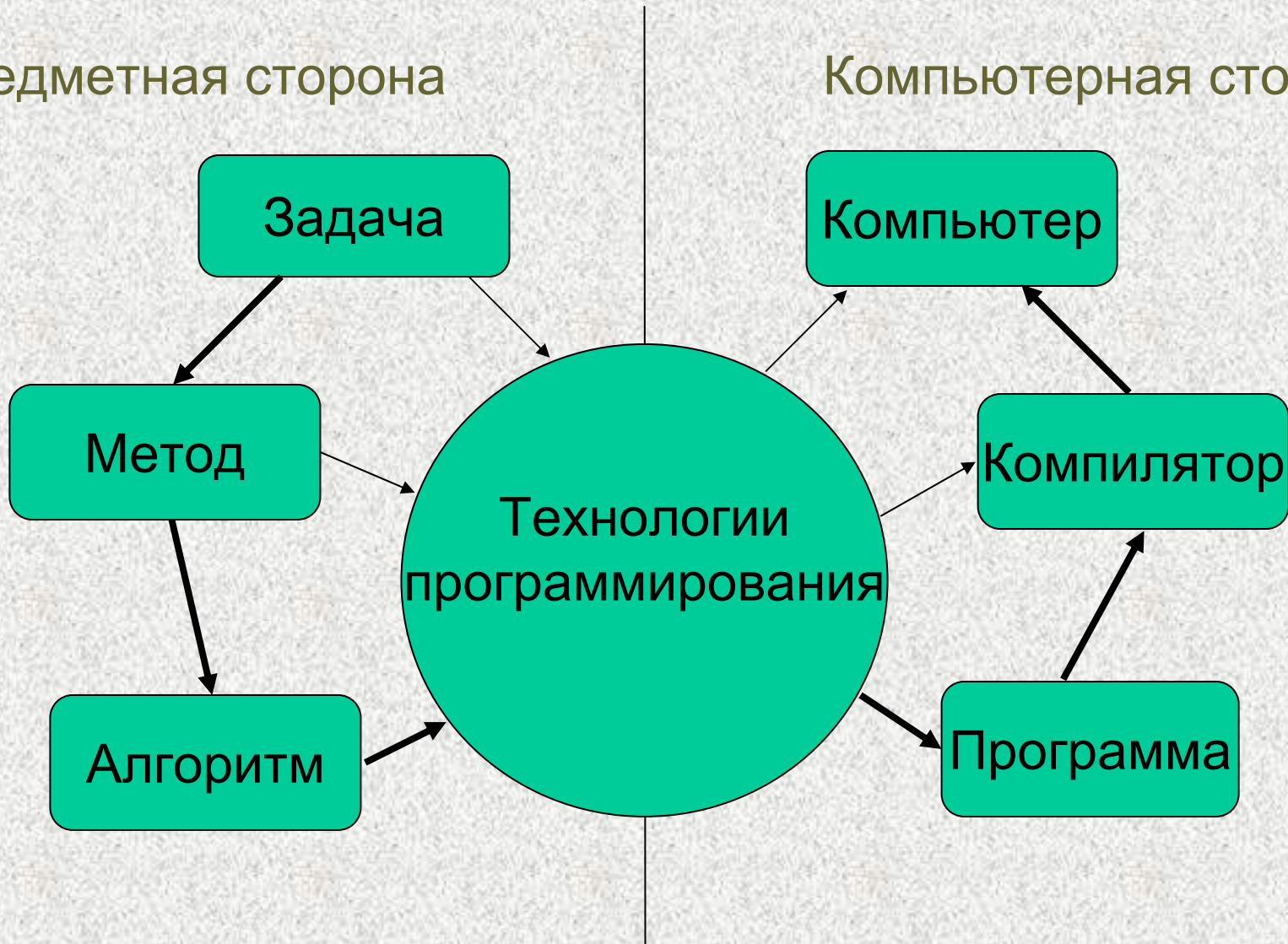




# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона

Компьютерная сторона



# *Технологии параллельного программирования*

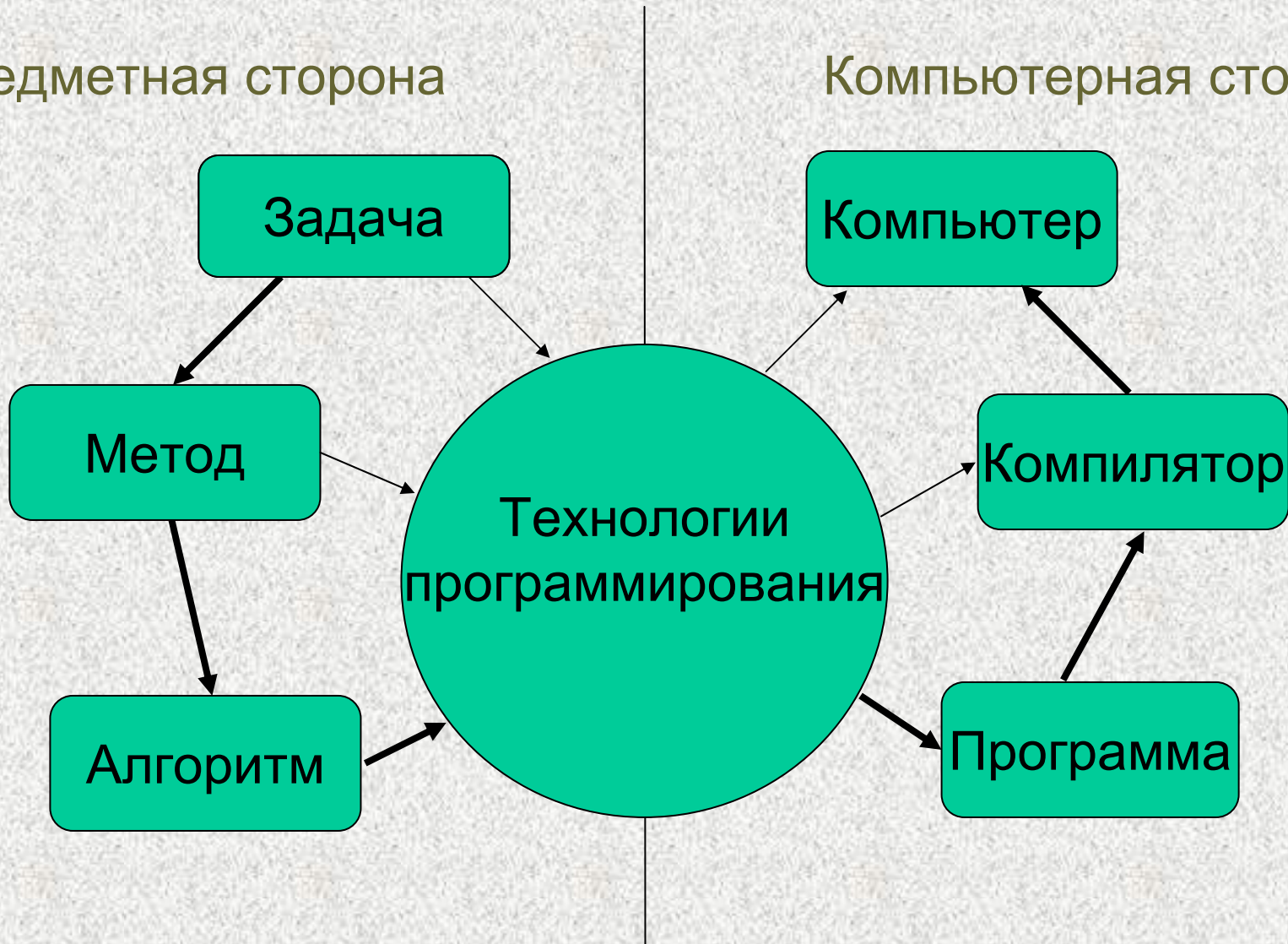
- Традиционные языки + компиляторы
- Расширения последовательных языков, спецкомментарии
- Специальные языки параллельного программирования
- Библиотеки и интерфейсы для взаимодействия параллельных процессов: MPI, PVM, Linda, Shmem...
- Параллельные предметные библиотеки: SCALAPACK, FFTW, DFFTPack, PETSc, CRAY Scientific Library...
- Специализированные пакеты и программные комплексы: PC-GAMESS, PRIRODA, GAUSSIAN, CFX, FlowVision...

***ЭФФЕКТИВНОСТЬ - ПЕРЕНОСИМОСТЬ - ПРОДУКТИВНОСТЬ***

# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона

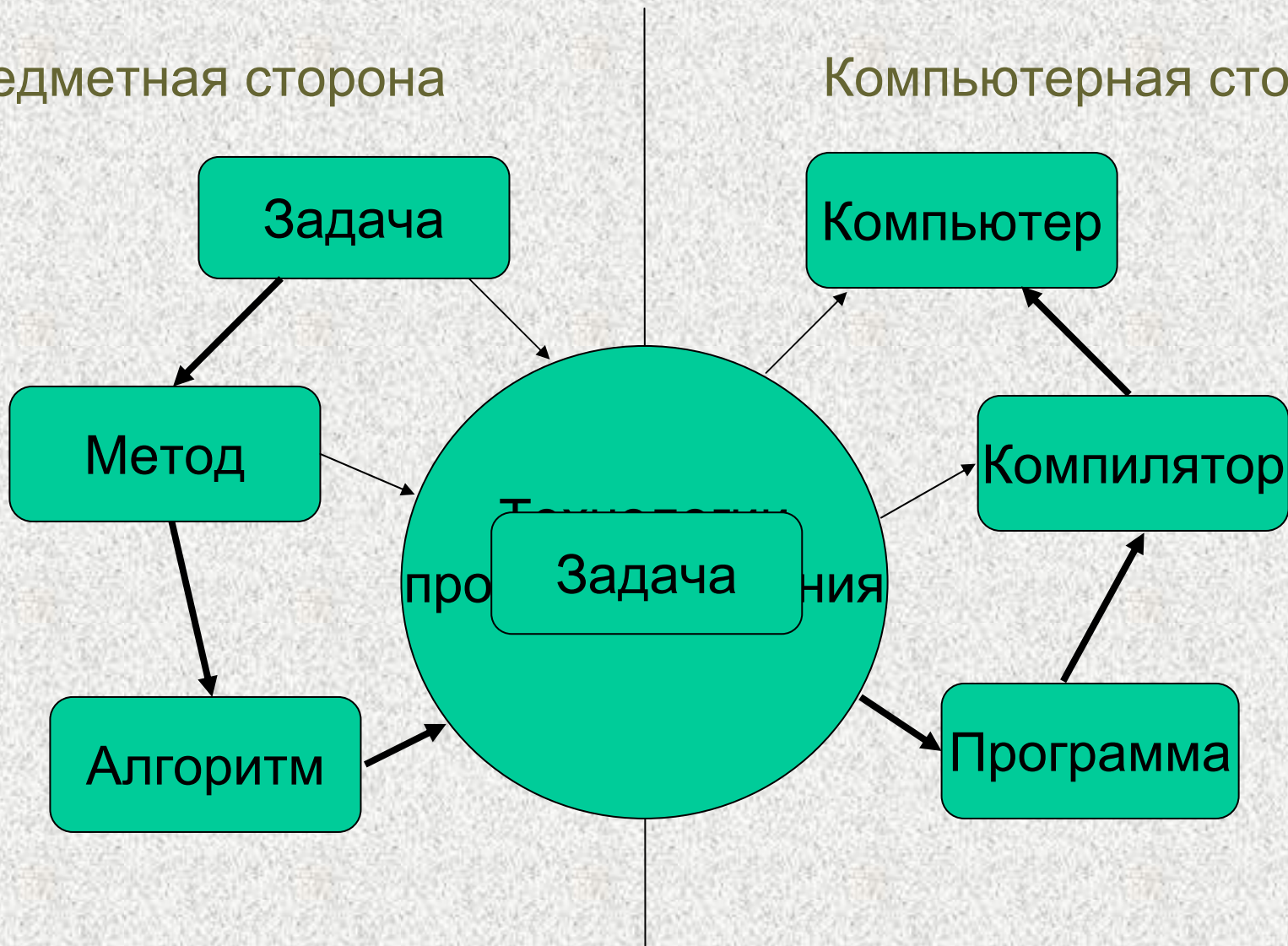
Компьютерная сторона



# Схема решения задачи на компьютере

Предметная сторона

Компьютерная сторона





SELIGER - Mozilla

File Edit View Go Bookmarks Tools Window Help

http://seliger.tversu.ru/cfd/cfdd.html

Home Bookmarks mozilla.org Latest Builds

SELIGER



SELIGER | cCFDd - D | cCFDd - S | Theory - S

---

cluster Computational Fluid Dynamics domain

---

**Project**

cCFDd is developing in the network of grant of [RFBF](#) (Russian Foundation for Basic Research) : "Development of Informational and Computational Environment with Cluster Resources for Simulation in Thermohydrodynamics" - grant #02-07-90049.

cCFDd has two interpretations:

1. **cCFDd** is a collaborative project between the Departments of Mathematics and Departments of Hydroaerodynamics of Technical Universities in Tver and Saint-Petersburg. This project aims to provide a relatively complete environment with cluster nodes parallelization for time-consuming computer memory and resource-power multidomain CFD applications.

The interface shell, pre- and postprocessors, numerical kernel of net reachable **cCFDd** with parallel subdomains CFD DNS simulation are developing.

2. **cCFDd** is a portable parallel computer Beowulf system - cluster of PCs, connected with an ethernet switch. This distributed memory system allows for very fast processor-to-memory communication via memory bus and network.


TSTU for

SELIGER - Mozilla

File Edit View Go Bookmarks Tools Window Help

http://seliger.tversu.ru/index.html

marks mozilla.org Latest Builds



CFDd | ABCREAD | netSINF | Benchmark | Reports | D.Math | D.Hydro

---

System of Embedded - Linked Information and Graphics for Researchers

---

The Informational and Computational System (second version) - **I&CS<sub>2</sub>** named as **SELIGER** - System of Embedded-Linked Information and Graphics for Engineers and Researchers destined for CFD modelling and investigations in the field of fluid mechanics applications, heat/mass transfer and related sciences.

The recent system includes both desktop and reachable via Internet solvers on different servers, desktop and client's programs to pre- and post-process and to analyze results, the CFD information resources are maintained (benchmark data base, reports, publications)

A numerical core of system contains 2.5D and 3D Navier-Stokes/Euler and heat transfer solvers that were developed on the basis of desktop system **SINF** - **S**upersonic-to-**I**ncompressible **F**low. The desktop version of this in-house code being developed for ten years to simulate compressible and incompressible, laminar and turbulent fluid flows. At the moment, this 3D steady/unsteady Navier-Stokes solver is based on the second-order finite-volume spatial discretisation using the cell-centred variable arrangement and body-fitted block-structured non-overlapping grids. An original virtual-block concept implemented in the solver ensures the conservation of fluxes at block interfaces for both matched and non-matched grids. Discretisation of time derivatives is done with a three-level second-order implicit scheme. In case of incompressible flows, the artificial-compressibility technique is applied at each physical time step. The QUICK scheme is employed to compute convective fluxes.

Computational methods implemented within SINF make possible applications to viscous flows over a large range of the Reynolds numbers, as well as to inviscid flows. In case of turbulent flows, various versions of high-Reynolds-number, low-Reynolds-number k-epsilon models and LES are open to the user.

**SELIGER solvers**

- ◆ **netSINF** - net Supersonic-to-**I**ncompressible **F**low

netSINF\_simulation - Mozilla

File Edit View Go Bookmarks Tools Window Help

http://seliger.tversu.ru/netSINF/netSINF.html

Home Bookmarks mozilla.org Latest Builds

netSINF\_simulation



SELIGER | Theory - S

---

net Supersonic-to-**I**ncompressible**F**low

---

**Info**

The present-day netSINF CFD solver is under operation testing.



**Access to netSINF**

Users must log on server with solver **netSINF**. They must accomplish procedure of authorization: to put into authorization window login and password.

After authorization procedure the user can work in assigned for him domain. He can decide between different variants of simulation systems in **Task Manager** using the client "Add Task". In case of CFD simulation on basis of netSINF he must choose a tool **netSINF**.



# Поиск молекул-ингибиторов для заданных белков-мишеней в распределенной вычислительной среде

НИВЦ МГУ, ИБМХ РАМН

Время расчета: 31 дек. 2005 – 11 янв. 2006,

Процессорное время: 42774 часа = 1782 дня =

> **4.5 года** работы одного процессора

Общее число работавших процессоров: 273,

Максимально процессоров одновременно: 244,

Пиковая производительность: >1 Tflops

Вычислительная среда:

кластеры МГУ + кластер ЮУрГУ (г.Челябинск) + учебный класс

НИВЦ МГУ + компьютеры в лабораториях

X-Com



PARALLEL.RU

**КОНКУРС ПРОЕКТОВ**

intel®

**Корпорация Intel  
и информационно-аналитический центр Parallel.ru**

*объявляют конкурс проектов по разработке и  
внедрению учебно-методических комплексов в области  
параллельных компьютерных технологий и  
высокопроизводительных вычислений.*

Победители конкурса получают гранты корпорации Intel на создание соответствующих учебно-методических комплексов, издание учебных пособий, а также приобретение оборудования и учебных компьютерных классов на базе многоядерных микропроцессоров на общую сумму до 30 тысяч долларов США.

**Прием заявок открыт до 5 февраля 2006 года**

**Правила оформления заявок, тематика  
и другие детали конкурса опубликованы на [Parallel.ru](http://Parallel.ru)**

научно-практический семинар

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

*ТЕХНОЛОГИИ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО  
ПРОГРАММИРОВАНИЯ –  
СВОБОДА ТВОРЧЕСТВА ИЛИ ЖЕСТКИЕ  
РАМКИ ПРАВИЛ?*

Вл.В.Воеводин  
НИВЦ МГУ

voevodin@parallel.ru

Челябинск, ЮУрГУ, 26 января 2006г.