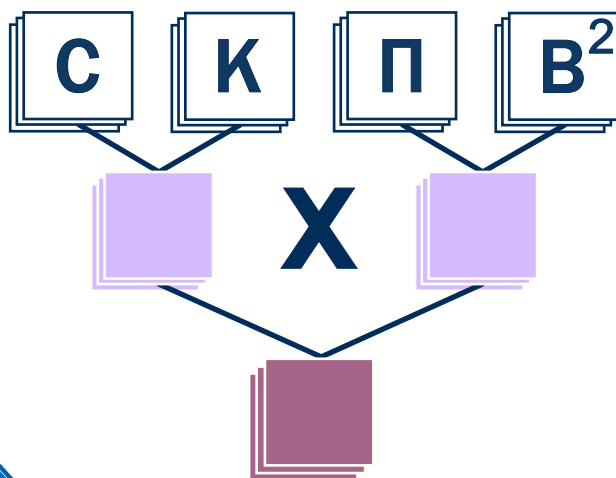


**X СИБИРСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ И
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМ
ВЫЧИСЛЕНИЯМ**



**ПРОГРАММА
КОНФЕРЕНЦИИ
2021**

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

**ДЕСЯТАЯ СИБИРСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ И
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМ
ВЫЧИСЛЕНИЯМ**

**ПРОГРАММА И ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
(5–7 октября 2021 года)**

Издательство Томского университета
2021

Десятая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям: Программа и тезисы докладов (5–7 октября 2021 года). – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2021. – 37 с.

Представлены программа и тезисы докладов участников Десятой Сибирской конференции по параллельным и высокопроизводительным вычислениям, которая пройдет в Томском государственном университете с 5 по 7 октября 2021 года при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, Суперкомпьютерного консорциума России и Регионального научно-образовательного математического центра ТГУ.

Для научных сотрудников, преподавателей, аспирантов, студентов, использующих высокопроизводительные вычислительные ресурсы в научной и учебной работе.

ДЕСЯТАЯ СИБИРСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ И ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМ ВЫЧИСЛЕНИЯМ

С 5 по 7 октября 2021 года в Томском государственном университете при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и Регионального научно-образовательного математического центра ТГУ под эгидой Суперкомпьютерного консорциума университетов России пройдет Десятая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям (SibHPC'21). Конференция посвящена 100-летию со дня рождения выпускника физико-математического факультета ТГУ Героя Социалистического Труда Академика Н.Н. Яненко. Информация о предыдущих сибирских конференциях по параллельным вычислениям в ТГУ (2001, 2003, 2005, 2007, 2009, 2011, 2013, 2015, 2017 гг.) находится на сайте: <http://conference.tsu.ru/pvv>.

Целью конференции SibHPC'21 является обсуждение современных проблем математического моделирования, вычислительной математики и мягких вычислений (методов машинного обучения), параллельных вычислений и обработки больших объемов данных на компьютерах с параллельной архитектурой, привлечение талантливой молодежи к решению сложных научно-технических задач, обмен опытом подготовки специалистов по параллельным компьютерным технологиям.

Конференция пройдет в следующем формате: пленарное заседание и три секции:

- математическое моделирование, параллельные алгоритмы решения сложных задач;
- современные методы вычислительной математики, вычислительной механики и машинного обучения;
- технологии распределенных вычислений, средства и инструменты для разработки, анализа и оценки эффективности параллельных программ.

Программный комитет Десятой Сибирской конференции по параллельным и высокопроизводительным вычислениям

Шокин Ю.И., научный руководитель ФИЦ Информационных и вычислительных технологий, академик РАН, профессор, д.ф.-м.н.;

Воеводин Вл.В. директор Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета, член-корр. РАН, профессор, д.ф.-м.н.;

Веснин А.Ю. директор Регионального научно-образовательного математического центра Томского государственного университета, чл.-корр. РАН, профессор, д.ф.-м.н.;

Старченко А.В. заведующий кафедрой вычислительной математики и компьютерного моделирования ММФ ТГУ, профессор, д.ф.-м.н.;

Толстых М.А. ведущий научный сотрудник Института вычислительной математики РАН, д.ф.-м.н.;

Мальшкин В.Э. заведующий отделом Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, профессор, д.т.н.;

Чубаров Л.Б. главный научный сотрудник ФИЦ Информационных и вычислительных технологий, д.ф.-м.н.;

Захаров Ю.Н. заведующий кафедрой ЮНЕСКО по информационным и вычислительным технологиям Кемеровского государственного университета, профессор, д.ф.-м.н.;

Гергель В.П. директор Института информационных технологий, математики и механики Нижегородского государственного университета, профессор, д.т.н.;

Nuterman R. PhD, Research coordinator, Faculty of Science, Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, Denmark;

Belikov D. PhD, Project researcher, Faculty of Environmental Earth Science, Hokkaido University, Japan;

Лобода Е.Л. заведующий кафедрой физической и вычислительной механики ММФ ТГУ, д.ф.-м.н.

Открытие конференции состоится 5 октября 2021 года в 10.00 в очно-заочном формате.

Программа Десятой Сибирской конференции по параллельным и высокопроизводительным вычислениям

5 октября 2021 года

(конференц-зал ТГУ, 229 аудитория Главного корпуса ТГУ,
видеоконференция Zoom, 10:00 – 18:00)

10:00 Открытие конференции

10:00-10:15 Старченко А.В. (ТГУ, Томск) Юбилейная X Сибирская конференция по параллельным вычислениям.

10:15-10:30 Берцун В.Н. (ТГУ, Томск) Страницы жизни и научной деятельности академика Николая Николаевича Яненко.

Пленарные доклады

10:30-11:00 Захаров Ю. Н., Борисов В. Г., Виноградов Р.А., Дербилова В.П., Шокин Ю. И., Матусевич В.В., Капран Т.И., Онищенко П. С., Казанцев А. Н. (КемГУ, Кемерово) Цифровая модель каротидной эндартерэктомии.

11:00-11:30 Зюзьков В.М. (ТГУ, Томск) Экспериментальная математика.

11:30-12:00 Кофе-брейк

12:00-12:30 Толстых М. А., Фадеев Р.Ю., Шашкин В.В, Травова С.В., Гойман Г.С., Алипова К.А. (ИВМ РАН, Москва) Развитие многомасштабной глобальной модели атмосферы ПЛАВ.

12:30-14:00 Перерыв на обед

Устные доклады

14:00-14:15 Шумилов Б.М. (ТГАСУ, Томск) О методе обратной факторизации и расщеплении сплайн-вейвлетов.

14:15-14:30 Берцун В.Н. (ТГУ, Томск) О кратномасштабном вейвлет-анализе сеточных функций.

14:30-14:45 Паничкин А.В. (Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Новосибирск, Омск) Исследование точности конечно-разностных схем с алгоритмом уменьшения схемной вязкости при численном расчете двумерных струйных течений жидкости.

14:45-15:00 Куликов Е.К., Макаров А.А. (СПбГУ, Санкт-Петербург) О методах локальной аппроксимации минимальными сплайнами.

15:00-15:15 Данилкин Е.А., Старченко А.В., Проханов С.А., Лещинский Д.В. (ТГУ, Томск) Разработка гибридной схемы распараллеливания для

численного решения уравнений пространственной мезомасштабной метеорологической модели атмосферного пограничного слоя.

15:15-15:30 Овчинников В. А., Ефимов К.Н., Якимов А.С. (ТГУ, Томск) Численное исследование влияния переменного угла атаки на сопряженный теплообмен при пространственном обтекании сферически затупленного конуса.

15:30-15:45 Городничев М.А., Рудыч П.Д. (ИВМиМГ СО РАН, НГУ, НГТУ, ФИЦ ИВТ, НТУ «Сириус», Новосибирск) Применение платформы HPC Community Cloud для создания сервиса высокопроизводительной обработки данных ЭЭГ.

15:45-16:00 Ни А.Э. (ТПУ, Томск) Параллельная реализация гибридной мезомакроскопической модели на GPU.

16:00-16:30 Кофе-брейк

16:30-16:45 Данилкин Е.А., Старченко А.В., Проханов С.А., Лещинский Д.В. (ТГУ, Томск) Параллельная реализация метода сопряженных градиентов для решения системы линейных алгебраических уравнений в мезомасштабной метеорологической модели атмосферного пограничного слоя.

16:45-17:00 Стуколов С. В., Захаров Ю.Н. (КемГУ, Кемерово) Моделирование закрутки потока теплоносителя в системах отопления.

17:00-17:15 Анисимова И. В., Игнатьев В.Н. (КазНИТУ им. А.Н. Туполева, Казань) Определение значений переносных характеристик в многокомпонентных средах на основе анализа микропроцессов.

17:15-17:30 Nuterman R., Häfner D., Jochum M. (Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, Copenhagen, Denmark) General circulation modelling in Python on CPU and GPU.

17:30-17:45 Зинченко В.И., Гольдин В.Д., Лаева В.И. (ТГУ, Томск) Расчет сопряженного нестационарного теплообмена затупленных тел при их сверхзвуковом обтекании.

17:45-18:00 Новиков П. Л., Павский К. В., Двуреченский А. В. (Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск) Построение потенциального рельефа структурированной подложки кремния методом молекулярной динамики.

6 октября 2021 года

(видеоконференция Zoom, 10:00 – 13:15)

Пленарный доклад

10:00-10:30 Снытников А. В., Пухов А. М., Романенко А. А., Лаврентьев М. М. (Институт автоматки и электрометрии СО РАН, Новосибирск) GPU implementation of the Q-VLPL3D plasma simulation code.

Устные доклады

10:30-10:45 Гурина Е. И. (ТГУ, Томск) Математические модели и численные алгоритмы для расчета взаимодействия двух осевых вентиляторов.

10:45-11:00 Ботыгин И.А., Шерстнёв В.С., Шерстнёва А.И. (ТПУ, Томск) Исследование возможностей языка программирования R для обработки больших данных.

11:00-11:15 Хамидов А.Н. (ТГУ, Томск) Исследование математической модели типа “хищник—жертва” с учетом поискового поведения хищника.

11:15-11:30 Дель И. В., Старченко А. В. (ТГУ, Томск) Прогноз приземной температуры воздуха на основе модели рекуррентной нейронной сети типа LSTM.

11:30-11:45 Лещинский Д.В., Данилкин Е.А. (ТГУ, Томск) Влияние расположения источника загрязнения на концентрацию примеси в уличном каньоне.

11:45-12:00 Власенко А.Ю., Мичуров В.А. (НГУ Новосибирск) Автоматизированная отладка фрагментированных программ в системе LuNA.

12:00-12:15 Перепёлкин В.А., Иванов М.И. (ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск) Trace-Based Automatic Performance Optimization in LuNA Programs.

12:15-12:30 Павский К. В., Павский В. А. (Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск) Математическая модель для оценки потенциальных возможностей эффективности функционирования масштабируемых вычислительных систем при групповом восстановлении.

12:30-12:45 Городничев М.А., Нестёркина А.А. Библиотека для разработки параллельных программ, способных реагировать на изменения в доступности вычислительных ресурсов.

12:45-13:00 Токмашева Е. И., Курносов М. Г. (Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, Новосибирск) Алгоритмы барьерной синхронизации для NUMA-систем.

13:00-13:15 Каратаева Е. А., Шельмина Е. А. (ТГУ, Томск) Численное решение обратной задачи переноса примеси.

13:15 **Закрытие конференции**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ ДЕСЯТОЙ СИБИРСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ ПО ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ И ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМ ВЫЧИСЛЕНИЯМ

ЦИФРОВАЯ МОДЕЛЬ КАРОТИДНОЙ ЭНДАРТЕРЭКТОМИИ

*В.Г. Борисов, Ю.Н. Захаров, Р.А. Виноградов, В.П. Дербилова,
Ю.И. Шокин, В.В. Матусевич, Т.И. Капран, П.С. Онищенко, А. Н. Казанцев*

Важным аспектом подготовки к операции по удалению стеноза в каротидной бифуркации сонной артерии является анализ её осуществления и возможные послеоперационные осложнения.

В докладе приводится виртуальная методика проведения операции по удалению стеноза в каротидной бифуркации основанная на разработке цифровой модели течения крови в сонной артерии.

Цифровая модель бифуркации создается по следующей схеме.

1) По данным компьютерной томографии строится 3D модель геометрической формы бифуркации сонной артерии.

2) В построенной геометрической модели методами вычислительной гидродинамики проводятся расчеты нестационарного течения крови. На входе в сосуд задается временная зависимость объемной скорости течения, соответствующая обобщенной «нормальной» огибающей спектра доплерографии здорового молодого человека.

3) На стенках сосудов рассчитывается распределение гемодинамических показателей OSI, TAWSS, RRT.

4) Визуализируется динамическая картина течения крови в бифуркации и обозначаются критические зоны гемодинамических показателей.

На основе этой методики. Было проведено цифровое моделирование бифуркации у более десятка добровольцев без выраженной патологии сонной артерии («нормальные показатели здоровья») и у нескольких пациентов со стенозом сонной артерии. Так же была смоделирована виртуальная операция каротидной эндартерэктомии конкретного пациента по его гемодинамическим данным.

Анализ полученных данных показал, что можно выделить области на боковой поверхности сосуда, которые относятся к зонам риска возникновения атеросклероза.

Сравнение «нормальных» показателей с послеоперационными позволяет сделать выводы о том, в какой степени послеоперационная гемоди-

намическая ситуация может способствовать возникновению патологических изменений стенок сосуда и возможному возникновению рестеноза.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

В.М. Зюзьков

Описываются особенности экспериментальной математики. Рассматриваются два исследования в теории чисел, сделанных с помощью Wolfram Mathematica. Первое, уже прежде опубликованное, содержало доказательства сравнений вида $F(A(p)) \equiv qF(\text{expr}) \pmod{p}$. Используются обозначения: $F(n)$ – n -е число Фибоначчи, p – простое число, q равно ± 1 , $A(p)$ есть произвольный многочлен от p и expr – более простое выражение, содержащее только коэффициенты многочлена $A(p)$ и не содержащее p . Второе исследование заканчивается теоремой о том, что асимптотическая плотность интервалов, кратных b , между соседними простыми числами равна $\frac{1}{2}$. Первое исследование упоминается с целью сравнить роли экспериментов для этих двух задач. В первом исследовании эксперименты были необходимы – они помогли сформулировать цепочки достоверных догадок, доказать которые оказалось уже нетрудно. Во втором исследовании можно было прийти к формулировке теоремы о значении $\frac{1}{2}$ для предела без экспериментальных вычислений. Но эксперименты дополнительно показали, каким образом осуществляется предельный переход на протяжении первых 80 миллионов простых чисел.

Литература

1. Wolfram S. A New Kind of Science, Wolfram Media, 2002, – 1197 p.
2. Пойа Д. Математика и правдоподобные рассуждения. – М.: «Наука», Главная редакция физ.-мат. литературы, 1975. – 464 с.
3. Пойа Д. Математическое открытие: Решение задач: основные понятия, изучение и преподавание: пер. с англ. – 3-е изд. – М.: КомКнига, 2010. – 448 с.
4. Лакатос И. Доказательства и опровержения: Как доказываются теоремы. – 2-е изд. – М.: Издательство ЛКИ, 2010. – 152 с.

РАЗВИТИЕ МНОГОМАСШТАБНОЙ ГЛОБАЛЬНОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРЫ ПЛАВ

М.А. Толстых, Р.Ю. Фадеев, В.В. Шашкин, С.В. Травова, Г.С. Гойман, К.А. Алипова

Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН
Гидрометцентр России

Модель общей циркуляции атмосферы ПЛАВ разработана в ИВМ РАН и Гидрометцентре России, применяется для оперативного среднесрочного и долгосрочного прогноза погоды. Представлен обзор работ последних лет, направленных как на развитие новой версии модели для среднесрочного прогноза горизонтальным разрешением около 10 км, так и на повышение качества прогнозов существующей оперативной версии с разрешением около 20 км. Особое внимание уделяется повышению эффективности распараллеливания программного комплекса модели, в частности, повышению эффективности OpenMP, внедрение параллельного ввода вывода, переводу части вычислений с двойной в одинарную точность. В результате выполненных работ время расчета прогноза на 24 часа сократилось более, чем в два раза, до 20 минут на 2916 процессорных ядрах системы Cray XC40. Отдельным направлением работ является создание ансамблевой системы прогноза. Для этого требуется учет неопределенности параметрического представления процессов подсеточного масштаба. Представлены результаты работы системы ансамблевого прогноза.

Литература

1. Толстых М.А., Фадеев Р.Ю., Шашкин В.В., Гойман Г.С., Зарипов Р.Б., Киктев Д.Б., Махнорылова С.В., Мизяк В.С., Рогутов В.С. Многомасштабная глобальная модель атмосферы ПЛАВ: результаты среднесрочных прогнозов погоды. *Метеорология и Гидрология*, 2018, N 11, С. 90-99.
2. Mizyak V., Rogutov V., Alipova K. Development of the new ensemble weather prediction system at the Hydrometcentre of Russia. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. V. 1740 012072

О МЕТОДЕ ОБРАТНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ И РАСЩЕПЛЕНИИ СПЛАЙН-ВЕЙВЛЕТОВ

Б.М. Шумилов

Томский государственный архитектурно-строительный университет

В работе исследован неявный метод разложения кубических сплайнов гладкости C^2 на серию вейвлетов со смещенными относительно полуортогонального случая носителями. Обосновано расщепление алгоритма вейвлет-преобразования на решение семидиагональной системы линейных уравнений со строгим диагональным преобладанием с последующим восстановлением коэффициентов сплайна на вложенном слое и вейвлет-коэффициентов с помощью усредняющих соотношений. Для построения алгоритма расщепления кубических сплайн-вейвлетов используется свойство обнуления первых шести моментов. Сначала на бесконечной сетке строится система кубических базисных сплайн-вейвлетов, реализующих условия ортогональности ко всем полиномам фиксированной степени. Затем, с использованием однородных граничных условий Дирихле, пространства адаптируются к случаю ортогональности для всех многочленов пятой степени на конечном отрезке. Оригинальность исследования состоит в получении неявных конечных соотношений, связывающих коэффициенты сплайн-разложения на начальном масштабе со сплайн-коэффициентами и вейвлет-коэффициентами на вложенном масштабе ленточной системой линейных алгебраических уравнений с невырожденной матрицей. После исключения четных строк системы результирующая матрица вейвлет-преобразования будет иметь пять либо семь диагоналей вместо трех в случае с двумя нулевыми моментами. Обнаружено отсутствие строгого диагонального преобладания по столбцам системы. Для случая семидиагональной матрицы выполнена модификация системы, обеспечивающая строгое диагональное преобладание и, как следствие, устойчивость вычислений. Представлены результаты численных экспериментов по точности на многочленах и сжатию сплайн-вейвлет разложений.

Описаны проблемы моделирования поверхностей автомобильных дорог с использованием данных лазерного сканирования. Показаны примеры наложения спроектированной дороги на предварительно обработанные лазерные измерения. Числа и графики, следующие из экспериментов, показывают, что новое вейвлет-преобразование может быть использовано в алгоритме обнаружения трещин и повреждений дорожного полотна при анализе и планировании ремонтов автомобильных дорог. При этом, в отличие от ранее известного преобразования вейвлет-Эрмита, численное вычисление производных не требуется.

Литература

1. Шумилов Б.М. Алгоритм с расщеплением вейвлет-преобразования эрмитовых кубических сплайнов // Вестник Томского государственного университета. Сер. Математика. Механика. 2010. № 4. С. 45-55.
2. Шумилов Б.М. Кубические мультвейвлеты, ортогональные многочленам, и алгоритм с расщеплением // Сибирский журнал вычислительной математики. 2013. № 3. С. 283-297.
3. Шумилов Б.М. Алгоритм с расщеплением для кубических сплайн-вейвлетов с двумя нулевыми моментами на отрезке // Сибирские электронные математические известия. 2020. Т. 17. С. 2105-2121.
4. Шумилов Б.М. О расщеплении для кубических сплайн-вейвлетов с четырьмя нулевыми моментами на отрезке // Вычислительные технологии. 2021. Т. 26. № 2. С. 72-87.

О КРАТНОМАСШТАБНОМ ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗЕ СЕТОЧНЫХ ФУНКЦИЙ

В.Н. Берцун

Томский Государственный Университет

Термин «вейвлет» в переводе с английского означает «маленькая волна» или «короткий всплеск». Его ввели Гроссман и Морле в середине 80-х годов в связи с анализом свойств сейсмических и акустических сигналов [1,2]. Вейвлет-анализ является одним из востребованных разделов математики и ее приложений, как составная часть технологии мягких вычислений, используемая для предварительной обработки данных в системах искусственного интеллекта. Кратномасштабный вейвлет-анализ который основан на использовании последовательности вложенных подпространств, позволяет анализировать сигнал одновременно для разных масштабов [3]. Основной идеей этой теории является разделение исходного сигнала на два потока А и В, один из которых (А) отображает средние значения, а другой (В) напротив – быстроменяющуюся часть потока. В работе рассматриваются свойства ортонормированных масштабирующих функций и вейвлетов Хаара. Приводятся примеры кратномасштабного анализа сигналов.

Литература

1. Добеши И. Десять лекций по вейвлетам. Москва: РХД, 2001.
2. Малла С. Вейвлеты в обработке сигналов. М.: Мир, 2005. 671 с.
3. Смоленцев Н.К. Основы теории вейвлетов. Вейвлеты в MATLAB. – Москва: ДМК Пресс. – 2014. – 628 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТОЧНОСТИ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫХ СХЕМ С АЛГОРИТМОМ УМЕНЬШЕНИЯ СХЕМНОЙ ВЯЗКОСТИ ПРИ ЧИСЛЕННОМ РАСЧЕТЕ ДВУХМЕРНЫХ СТРУЙНЫХ ТЕЧЕНИЙ ЖИДКОСТИ

А.В. Паничкин

Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН

На примере двухмерной тестовой задачи со струйным обтеканием потоком вязкой жидкости препятствия было проведено исследование точности некоторых конечно-разностных схем при больших числах Рейнольдса (Re от 10^2 до 10^4) на равномерных регулярных сетках с ограниченным количеством узлов (от 21 до 161 в каждом пространственном направлении). Проведено сравнение расчетов на конечном интервале безразмерного времени с применением алгоритма уменьшения схемной вязкости для известных схем, обладающих равномерной сходимостью по малому параметру, а также для адаптированной схемы в дивергентном виде. Применение двухмерных вложенных регулярных сеток позволило определить асимптотические порядки точности рассмотренных схем с расчетом нестационарного течения вязкой жидкости на начальном этапе установления с использованием схемы расщепления вида стабилизирующей поправки в широком диапазоне чисел Рейнольдса, а также исследовать на таких сетках повышение точности численных решений по методу экстраполяции Рундсона. Расчеты по схемам без использования алгоритма уменьшения схемной вязкости при повышенных числах Рейнольдса приводят к численным решениям для тестового примера течения жидкости с большими отклонениями от численных решений по улучшенным схемам из-за присутствия схемной вязкости при использовании сеточных шагов, намного больших величины $1/Re$ при рассмотрении безразмерных параметров.

О МЕТОДАХ ЛОКАЛЬНОЙ АППРОКСИМАЦИИ МИНИМАЛЬНЫМИ СПЛАЙНАМИ

Е.К. Куликов, А.А. Макаров

Санкт-Петербургский государственный университет

Решением общей задачи интерполяции является полиномиальный сплайн максимальной гладкости. Такой сплайн имеет нелокальный характер, для определения коэффициентов при базисных функциях необходимо решать систему уравнений, порядок которой совпадает с количеством точек интерполяции. Поэтому активно развиваются локальные методы, в

которых упомянутые коэффициенты вычисляются как значения аппроксимационных функционалов, представляющих из себя, например, значения функции и ее производных в нескольких точках.

В докладе рассматриваются различные способы построения функционалов, используемых при локальной аппроксимации минимальными сплайнами [1,2]. Такие сплайны являются неполиномиальным обобщением B -сплайнов, они обладают локальным носителем и являются на нем гладкими функциями. Установлено, что в случае использования полиномиальной генерирующей вектор функции для построения минимальных сплайнов такие функционалы совпадают с известными квазиинтерполяционными функционалами [3,4].

Предлагаемый подход к построению аппроксимации, ввиду локальности носителя сплайна и метода построения функционалов, допускает эффективное распараллеливание рассматриваемых методов аппроксимации.

Литература

1. Ю.К. Демьянович, «Гладкость пространств сплайнов и всплесковые разложения» // Докл. РАН. 2005. Т. 401, №4. С. 1-4.
2. A.A. Makarov, «Construction of Splines of Maximal Smoothness» // J. Math. Sci., 178:6 (2011), 589-604.
3. P. Sablonniere «Quadratic spline quasi-interpolants on bounded domains of \mathbb{R}^d , $d = 1, 2, 3$ », Rend. Sem. Mat., vol. 61(3), 2003, 229-246.
4. А. И. Гребенников «Метод сплайнов и решение некорректных задач в теории приближений», М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983, 208 с.

РАЗРАБОТКА ГИБРИДНОЙ СХЕМЫ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ МЕЗОМАСШТАБНОЙ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРНОГО ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ

А.В. Старченко, Е.А. Данилкин, С.А. Проханов, Д.В. Лещинский
Томский государственный университет

Одной из актуальных проблем как фундаментальных, так и прикладных наук является создание математического и суперкомпьютерного программного обеспечения для информационных систем мониторинга и прогнозирования состояния приземного слоя атмосферы над населенными пунктами и крупными транспортными узлами. В ТГУ разрабатывается и

используется для прогноза локальной погоды мезомасштабная метеорологическая модель высокого разрешения TSUNM3 [1].

Данная работа посвящена построению гибридной схемы распараллеливания алгоритма для численного решения уравнений пространственной мезомасштабной метеорологической модели атмосферного пограничного слоя. Гибридный алгоритм построен как комбинация двух технологий параллельного программирования MPI и OpenMP. Библиотека MPI используется для взаимодействия между процессами, а распараллеливание в рамках каждого процесса выполняется с использованием технологии OpenMP. При расчетах на каждом вычислительном узле задействуются все ядра центрального процессора, но меняется соотношение числа потоков на один процесс.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-71-20042).

Литература

1. Старченко А.В., Барт А.А., Кижнер Л.И., Данилкин Е.А. Мезомасштабная метеорологическая модель TSUNM3 для исследования и прогнозирования состояния метеопараметров приземного слоя атмосферы над крупным населенным пунктом // Вестн Том. гос. ун-та. Математика и механика. – 2020. – № 66. – С. 35-55.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЕРЕМЕННОГО УГЛА АТАКИ НА СОПРЯЖЕННЫЙ ТЕПЛОМАССОБМЕН ПРИ ПРОСТРАНСТВЕННОМ ОБТЕКАНИИ СФЕРИЧЕСКИ ЗАТУПЛЕННОГО КОНУСА

К.Н. Ефимов, В.А. Овчинников, А.С. Якимов
Томский государственный университет

Сверхзвуковые летательные аппараты испытывают значительные тепловые и силовые воздействия, которые изменяют их форму, оказывают влияние на аэродинамические характеристики и динамику полета. Рассматривается движение сферически затупленного конуса в плотных слоях атмосферы, совершающего колебательное движение в плоскости угла атаки. Обтекание тела сверхзвуковым потоком химически равновесного воздуха описывается уравнениями пространственного турбулентного пограничного слоя [1]. Тепловое состояние пористой стальной сферической оболочки и конической части тела из углеродного материала описывается системой уравнений, представленной в работе [1]. Данная задача решалась в сопряженной постановке с использованием различные системы коорди-

нат в теле и пограничном слое, которые вследствие колебаний тела движутся относительно друг друга. Полученные результаты расчетов показали, что при обтекании тела, изменяющего положение тела относительно набегающего потока, распределение температуры поверхности тела имеет меньший перепад по окружной координате, чем при обтекании с постоянным углом атаки. Показано влияние периодических колебаний сферически затупленного конуса на характеристики сопряженного тепломассообмена.

Литература

1. Математическое и физическое моделирование тепловой защиты / А.М. Гришин, А.Н. Голованов, В.И. Зинченко, А.С. Якимов, К.Н. Ефимов. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2011. 358 с.

ПРИМЕНЕНИЕ ПЛАТФОРМЫ HPC COMMUNITY CLOUD ДЛЯ СОЗДАНИЯ СЕРВИСА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ЭЭГ

М.А. Городничев^{1,2,3}, П.Д. Рудыч^{3,4,5}

¹Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

²Новосибирский государственный университет

³Новосибирский государственный технический университет

⁴Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий

⁵Научно-технологический университет «Сириус»

Рассматривается проблема создания сервиса высокопроизводительной обработки ЭЭГ-данных с использованием платформы HPC Community Cloud (HPC2C) [1,2]. Задача сервиса – автоматизировать постановку нейрофизиологических экспериментов и обработку результатов для больших выборок испытуемых, от тысячи человек. Эксперимент может совмещать как блочные регистрации состояния покоя, так и события вызванных потенциалов, например, при выполнении контекстных задач по формированию умозаключений на уровне слов и на уровне текста.

Платформа HPC2C позволяет формально специфицировать сценарии применения вычислительных программ для решения задач на суперкомпьютерах. Сценарии описывают частичный порядок действий, связанных с организацией вычислительного процесса, специфицируют характеристики объектов данных, подаваемых на вход вычислительным программам, и результирующих объектов.

Формальная спецификация сценариев позволяет генерировать веб-приложение, которое пользователь применяет для высокоуровневой организации вычислений на суперкомпьютерах.

Литература

1. Городничев М. А., Вайцель С. А. Организация доступа к высокопроизводительным вычислительным ресурсам в HPC Community Cloud // Вестник ЮУрГУ. Серия: Вычислительная математика и информатика. - 2014. - Т. 3, № 4. - С. 85-95. - DOI: 10.14529/cmse140406.

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ГИБРИДНОЙ МЕЗОМАКРОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ НА GPU

А.Э. Ни

Томский политехнический университет

Проведено численное моделирование термогравитационного течения воздуха в замкнутом дифференциально подогреваемом объеме. Гидродинамические параметры потока рассчитывались мезоскопическим методом решеточных уравнений Больцмана [1] с применением трехмерной девятнадцати скоростной схемы и аппроксимации единовременной релаксацией интеграла столкновения, а термодинамические - традиционным методом конечных разностей при решении макроскопического уравнения энергии с использованием явной схемы. Параллельный код написан в высокоуровневой среде программирования MatLab и вычисления проводились на графическом ускорителе (GPU). Численные исследования проведены в широком диапазоне изменения числа Рэлея, соответствующем ламинарному и турбулентному режимам естественной конвекции, при постоянном числе Прандтля. Установлено, что при размерности расчетной сетки 201 в кубе вычисления на GPU GTX 1060 6GB быстрее более чем в 70 раз CPU Intel Core i5-4440. При этом используемые центральный и графический процессоры находятся в одной ценовой категории.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-00011, <https://rscf.ru/project/21-79-00011>

Литература

1. K. V. Sharma, R. Straka, F. W. Tavares Current status of Lattice Boltzmann Methods applied to aerodynamic, aeroacoustic, and thermal flows // Progress in Aerospace Sciences. — 2020. — Vol. 115, No. 100616. — P. 1–37.

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В МЕЗОМАСШТАБНОЙ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРНОГО ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ

А.В. Старченко, Е.А. Данилкин, С.А. Проханов, Д.В. Лецинский
Томский государственный университет

В настоящее время для краткосрочного прогнозирования и исследования погоды создаются и совершенствуются численные модели высокого пространственного разрешения, позволяющие предсказывать локальные региональные атмосферные явления для разных районов Земного шара. На базе Томского государственного университета разработана и используется для предсказания локальной погоды мезомасштабная метеорологическая модель высокого разрешения TSUNM3 [1].

Математическая формулировка мезомасштабной модели TSUNM3 включает одиннадцать нестационарных уравнений переноса, несколько замыкающих алгебраических соотношений и процедуру расчета поправки к негидростатической части давления. Расчет поправки давления занимает примерно 45 % от общего времени счета.

Для решения разностного уравнения для поправки давления в рабочей версии модели применяется полинейный метод Зейделя с красно-черным упорядочиванием. Целью работы является сокращение времени затрачиваемого на решения уравнения для поправки давления за счет реализации метода сопряженных градиентов с предобуславливателем на основе метода Зейделя.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-71-20042).

Литература

1. Старченко А.В., Барт А.А., Кижнер Л.И., Данилкин Е.А. Мезомасштабная метеорологическая модель TSUNM3 для исследования и прогнозирования состояния метеопараметров приземного слоя атмосферы над крупным населенным пунктом // Вестн Том. гос. ун-та. Математика и механика. – 2020. – № 66. – С. 35-55.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКРУТКИ ПОТОКА ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ В СИСТЕМАХ ОТОПЛЕНИЯ

Ю.Н. Захаров, С.В. Стуколов

Кемеровский государственный университет

В работе представлены результаты численного моделирования процесса прогрева теплоносителя в модельной системе отопления, состоящей из нагревательного элемента, радиатора охлаждения и соединительных трубок. Цель работы - сравнение эффективности съема тепла в котле отопления в зависимости от его компонентного исполнения: движение жидкости обусловлено только за счет конвекции вследствие прогрева теплоносителя в трубке теплообменника; с эмуляцией работы насоса; а также дополнительной закруткой потока, создаваемой за счет специального соединения между собой трубок топочного котла короткими прямыми переходами (патрубками).

Численное моделирование проведено в пакете OpenFOAM [1] решателем, реализующим систему уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска-Обербека [2].

Принудительное движение теплоносителя за счет использования насоса позволяет значительно ускорить процесс прогрева жидкости в системе отопления. Дополнительно увеличить эффективность съема тепла возможно за счет закрутки потока теплоносителя в виду увеличения приростной скорости потока.

Литература

1. OpenFOAM [Электронный ресурс]// <http://www.openfoam.org>
2. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЙ ПЕРЕНОСНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕДАХ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА МИКРОПРОЦЕССОВ

И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев

Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ

Определение значений переносных характеристик (вязкости, теплопроводности, диффузии и т.д.) является одной из важных проблем в теории многокомпонентных сред. В работе предлагается алгоритм определе-

ния коэффициентов переноса сред на основе анализа микропроцессов. Для этого используется молекулярно-кинетическая теория газов и жидкостей, а именно, столкновительная часть уравнения Больцмана [1]. В ней содержатся кратные несобственные интегралы с осциллирующими подынтегральными функциями. При интегрировании уравнения Больцмана методом Чепмена-Энскога, коэффициенты переноса выражаются через интегральные скобки полиномов Сонина, которые являются линейными комбинациями интегралов столкновения молекул. Их вычисление требует использования эффективных математически обоснованных алгоритмов, включая элементы параллельных вычислений [2].

Литература

1. Ferziger J and Kaper G 1972 *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases* (Amsterdam-London: North-Holland Publishing Company)
2. Яненко Н.Н. Проблемы вычислительной механики. В кн. Николай Николаевич Яненко. Очерки. Статьи. Воспоминания/ Сост.: Н.Н. Бородина. - Новосибирск: Наука, 1988, с. 72-102

GENERAL CIRCULATION MODELLING IN PYTHON ON CPU AND GPU

Roman Nuterman, Dion Häfner, and Markus Jochum

Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, Copenhagen, Denmark

Most state-of-the-art general circulation models (GCM), in particular those used at the largest compute scales, are written in FORTRAN. At the same time, modern high-level programming languages provide an opportunity to utilize new programming paradigms and hardware. Amongst them, Python stands out by its enormous popularity in the scientific community, powerful standard library and large third-party package ecosystem including modern high-performance machine learning frameworks. Our ocean GCM Veros is implemented in pure Python and interfaced with the machine learning library JAX. This allows us to run high-performance simulations on both CPU and GPU through identical code base, with full support for distributed architectures. On CPU, Veros is able to match the performance of a FORTRAN reference code, both on a single process and on hundreds of CPU cores. On GPU, we find that each device can replace dozens to hundreds of CPUs, at a fraction of the energy consumption. We also demonstrate the viability of using GPUs for GCM modeling by integrating a global 0.1 deg. eddy-resolving setup, where we achieve 1.3 model years per day on a single compute instance with 16 GPUs, comparable to over 2000 FORTRAN processes.

РАСЧЕТ СОПРЯЖЕННОГО НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕПЛООБМЕНА ЗАТУПЛЕННЫХ ТЕЛ ПРИ ИХ СВЕРХЗВУКОВОМ ОБТЕКАНИИ

В.И. Зинченко, В.Д. Гольдин, В.И. Лаева
Томский государственный университет

Рассмотрено сверхзвуковое обтекание сферически затупленных конусов, содержащих различные теплозащитные материалы. Задача решается в сопряженной постановке с учетом трехмерного течения в пограничном слое с учетом возможного перехода в турбулентный режим. Внутри тела решается трехмерная задача теплопроводности.

При расчете используется несколько численных методов. Распределение давления вдоль по поверхности тела определяется из невязкой задачи обтекания с использованием методов С.К.Годунова и Мак-Кормака. Поле течения в пограничном слое рассчитывается методом Петухова [1]. Задача теплопроводности решается методом "Ромб" Гаджиева-Писарева[2], обобщенным на трехмерный случай [3]. В работе приводится сравнение результатов с экспериментальными данными.

В результате расчетов показано, что использование теплозащитных материалов, обладающих высокой теплопроводностью, приводит к перетеканию тепла от лобовой части тела на боковую поверхность. Это может заметно снизить максимальные температуры тела в процессе полета. На основании полученных результатов предложены простые критериальные зависимости, позволяющие производить оценку снижения максимальной температуры поверхности без сложных вычислений.

Литература

1. Петухов И.В. // В сб. Численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений и квадратурные формулы. М.: Наука, 1964. С. 304.
2. Гаджиев А. Д., Писарев В. Н., Шестаков А. А.// Журнал вычислительной математики и математической физики. 1982. Т. 22. № 2. С. 339–347.
3. Зинченко В. И., Гольдин В. Д., Зверев В. Г. // Теплофизика высоких температур. 2018. Т. 56, № 5. С. 747-755.

ПОСТРОЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО РЕЛЬЕФА СТРУКТУРИРОВАННОЙ ПОДЛОЖКИ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

П.Л. Новиков^{1,2}, А.В. Двуреченский^{1,2}, К.В. Павский^{1,3}

¹ИФП СО РАН, г. Новосибирск,

²НГУ, г. Новосибирск,

³СибГУТИ, г. Новосибирск,

Методом молекулярной динамики рассчитан потенциальный рельеф структурированной подложки кремния, содержащей канавки. Данные структуры представляют интерес как подложка для выращивания массивов пространственно упорядоченных квантовых точек, имеющих потенциальное применение в оптических и опто-электронных приборах и устройствах нового поколения. Физическая модель основана на эмпирическом потенциале Терсоффа, описывающем межатомное взаимодействие в кристаллической системе Ge/Si. Особенность потенциала Терсоффа в том, что он учитывает уменьшение силы взаимодействия, когда число насыщенных связей атома превышает 4. Это актуально на стенках канавок, где встречаются нетипичные атомные конфигурации. Рассмотрен фрагмент подложки кремния $35 \times 35 \times 5$ нм³, содержащей параллельные канавки треугольного профиля в поперечном сечении (шириной 10 нм, глубиной 2 нм). На латеральные границы фрагмента были наложены периодические граничные условия, так что фактически объект исследования представлял собой квазibesконечную структуру с системой параллельных канавок. Произведен анализ потенциального рельефа и определены энергии в минимумах, в седловых точках и энергия активации поверхностной атомной диффузии по стенкам канавок. Расчеты производились с использованием алгоритма быстрой сортировки для поиска соседей в массиве атомов.

Исследования выполнены в рамках ГЗ 0242-2021-0011.

GPU IMPLEMENTATION OF THE Q-VLPL3D PLASMA SIMULATION CODE

A.V. Snytnikov, A.M. Pukhov, A.A. Romanenko, M.M. Lavrientiev

Virtual Laser Plasma Lab, or VLPL (A. Pukhov, J. Plasma Phys. 1999) is a code for simulation of plasma wakefield acceleration. Wakefield acceleration is widely studied both numerically and experimentally due to the possibility of building small but powerful particle accelerators.

VLPL code uses quasi-static Particle-In-Cell method for simulation of plasma motion and the classic Particle-In-Cell for simulation of beam passing through plasma. Electric fields are solved by means of Fourier Transform method implemented with FFTW.

Presently, we've got the following performance with Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2698 v4 processor: 40 ms for pushing beam particles, for 19190 particles total, 0.3 s is the duration of plasma particles push for 16384 plasma particles total per one layer, and the 2D FFT is performed in 218 us for 64x64 array.

In order to build GPU implementation of VLPL, the mentioned fragments of code were rewritten in a way more suitable for GPU. It means using surface memory, which is faster than the global GPU memory. Since cuFFT library lacks 2D real-to real transform, we implemented this kind of transform on our own, again using surface memory.

The performance of the GPU implementation was tested with recent Volta and Ampere GPUs resulting in the following performance (for Volta): 277 us for pushing beam particles, for 19190 particles total, 3.5 ms is the duration of plasma particles push for 16384 particles total per one layer, and the 2D FFT is performed in 80 us for 64x64 array.

One can see that there is some speedup compared to CPU performance. But the speedup itself is not very important. GPU implementation enables to perform large scale simulation in reasonable time.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ РАСЧЕТА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ ОСЕВЫХ ВЕНТИЛЯТОРОВ

Е.И. Гурина

Томский государственный университет

Стремительный рост вычислительных мощностей оказывает существенное влияние на все сферы современной науки и техники. Возникают новые задачи, связанные с расчетом турбулентных гидродинамических течений [1], инженерные расчеты которых традиционно сопровождаются моделями, использующими осредненные характеристики (т.н. RANS-модели).

В настоящей работе рассмотрено численное моделирование взаимодействия двух осевых вентиляторов [2], установленных в сети. Исследование проведено с помощью пакета гидродинамики Fluent [3] с использованием двухпараметрических моделей турбулентности.

Литература

1. Головизнин В. М., Зайцев М. А., Карабасов С. А., Короткин И. А. Новые алгоритмы вычислительной газовой гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов. М.: Издательство МГУ, 2013.
2. Степанов А. И. Центробежные и осевые компрессоры, воздухоудвки и вентиляторы. Теория, конструкция и применение: пер. с англ. / ред. К. З. Ушакова / А. И. Степанов. – М. : Машгиз, 1960.
3. Старченко А. В. Пакет прикладных программ FLUENT для решения задач механики жидкости и газа, тепло и массопереноса / А. В. Старченко, Д. А. Беликов, В. Д. Гольдин, Р. Б. Нутерман. – Томск : Изд-во Том. унта, 2008.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ЯЗЫКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ R ДЛЯ ОБРАБОТКИ БОЛЬШИХ ДАННЫХ

И.А. Ботыгин, В.С. Шерстнёв, А.И. Шерстнёва

Институт мониторинга климатических и

экологических систем СО РАН, Томск

Томский политехнический университет, Томск

Рассматривается использование пакетов языка статистического моделирования R для параллельного построения штрафных регрессионных моделей для больших наборов метеорологических данных. Файлы с наблюдениями хранятся на дисковом накопителе и считываются в память только во время подгонки модели. Матрицей ввода данных является `big.matrix`-объект. Создаётся функцией `as.big.matrix` из пакета `bigmemory`. Для распараллеливания вычислений используется стандарт OpenMP. Количество потоков для параллельных вычислений задаётся параметрически, исходя из имеющейся вычислительной мощности. Практическая апробация разработанного программного комплекса осуществлялась при работе с форматом хранения данных, используемого в ультразвуковом термоанометре. Интервал между измерениями параметров – 12.5 мс. В качестве регрессоров для температуры воздуха выбраны: скорость горизонтального ветра, направление горизонтального ветра, атмосферное давление, относительная влажность. Приведены результаты при подгонке регрессионных моделей, штрафуемых по методу Лассо, гребня и эластичной сети для больших данных, которые не могут быть загружены в память. Исследуемый инструментарий больше подходит для «широких» данных (с большим числом переменных-предикторов), чем для «длинных» данных (с большим количеством рядов наблюдений).

Литература

1. The comprehensive R archive network // URL: <https://cran.r-project.org/> (дата обращения: 15.04.2021).

ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТИПА “ХИЩНИК—ЖЕРТВА” С УЧЕТОМ ПОИСКОВОГО ПОВЕДЕНИЯ ХИЩНИКА

А.Н. Хамидов

Томский государственный университет

Рассматриваются два биологических вида, совместно обитающие в изолированной среде. Среда стационарна и обеспечивает в достаточной мере необходимый для жизни ресурс. В качестве ресурса выступает вид, называемый жертвой, а потребитель – хищником. Пространственная модель сообщества описывается системой дифференциальных уравнений [1]. Особенностью рассматриваемой модели является наличие трофической функции Холлинга, учитывающей насыщение рациона хищника при увеличении плотности популяции жертв и уравнения, описывающего поисковое поведение хищника. Для реализации задачи была выбрана неявная разностная схема. Её численное решение осуществлялось по программе, составленной на языке C++. В ходе работы были изучены вопросы: аппроксимации, устойчивости и сходимости разностного метода [2]. Результаты расчетов представлены в виде графиков с использованием пакета Matlab. Проведен анализ полученных результатов.

Литература

1. Тютюнов В.Ю., Сапухина Н.Ю., Сенина И.Н., Ардити Р. Явная модель поискового поведения хищника //Журнал общей биологии. — 2002. — Т.63, №2. — С.137 — 148.

2. Меркулова Н.Н. Методы приближенных вычислений/ Меркулова Н.Н., Михайлов М.Д. // Учебное пособие. —2014. —763 с.

ПРОГНОЗ ПРИЗЕМНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ВОЗДУХА НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ РЕКУРРЕНТНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ТИПА LSTM

И.В. Дель, А.В. Старченко

Томский государственный университет

Существуют различные способы прогноза метеорологических параметров: синоптическое прогнозирование, численный и статистический

методы прогноза, методы машинного обучения и нейронные сети. Чаще всего используются численные методы прогноза погоды, но методы нейросетевого прогнозирования вполне могут конкурировать со стандартными методами прогнозирования, так как это локальный, менее затратный способ прогнозирования метеорологических параметров.

Целью данной работы является реализация и применение модели рекуррентной нейронной сети типа LSTM для прогноза приземной температуры воздуха. По измеренным стационарной метеостанцией историческим значениям давления, температуры и относительной влажности, скорости и направления ветра поставлена задача предсказать значения приземной температуры воздуха и реализовать сравнение результатов прогнозирования с результатами прогнозирования модели многослойного перцептрона.

LSTM (Long short-term memory) — тип рекуррентных нейронных сетей с долгой кратковременной памятью. Все рекуррентные нейронные сети представляют собой цепочки повторяющихся модулей нейронной сети. Ключевым компонентом сети LSTM является состояние ячейки. Оно участвует в некоторых линейных преобразованиях и отвечает за процесс обучения, обратное распространение ошибки и обновление весов [1].

MLP (Multilayer Perceptron) – это класс искусственных нейронных сетей, состоящих из нескольких уровней перцептронов (искусственных нейронов) с пороговой активацией. Для получения значений весовых коэффициентов используется метод обучения с учителем, называемый обратным распространением ошибки [2].

В данной работе была построена и применена модель рекуррентной нейронной сети для прогноза приземной температуры воздуха в городе Томске, произведен сравнительный анализ реальных данных и результатов, полученных с помощью модели рекуррентной нейронной сети типа LSTM и проведено сравнение результатов прогнозирования искусственной нейронной сети с прогнозами модели многослойного перцептрона и численной модели WRF.

Литература

1. Hochreiter S., Schmidhuber J. Long Short-Term Memory // *Neural Computation*. 1997. V. 9. No. 8. P. 1735–1780.
2. Хайкин С. Нейронные сети. Полный курс. М: Вильямс, 2008. 1104 с.
3. Jason Brownlee. *Deep Learning for Time Series Forecasting. Predict the Future with MLPs, CNNs and LSTMs in Python*. – 2018. – 557 p.

ВЛИЯНИЕ РАСПОЛОЖЕНИЯ ИСТОЧНИКА ЗАГРЯЗНЕНИЯ НА КОНЦЕНТРАЦИЮ ПРИМЕСИ В УЛИЧНОМ КАНЬОНЕ

Д.В. Лещинский¹, Е.А. Данилкин²

¹Томский государственный университет

Данная работа посвящена построению и апробации математической модели для исследования процессов переноса примеси в уличных каньонах. Исследования такого рода актуальны для понимания микроклимата городов, полезны в планировании новых зданий и оценке зон повышенной экологической опасности. Математическая модель опирается на осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса. Замыкание системы дифференциальных уравнений осуществляется с использованием двухпараметрической $k-\epsilon$ модели, учитывающей влияние сил плавучести на турбулентную структуру течения, и градиентно-диффузионной гипотезы Бусинеска. Численное решение выполняется на основе метода конечного объема, монотонизированной схемы аппроксимации конвективных слагаемых и алгоритма SIMPLE для согласования полей скорости и давления [2].

В данной работе акцент делается на исследовании изменения максимальной концентрации каньоне. Рассмотрено три случая расположения источника загрязнения: в центре на дне уличного каньона, на дне у подветренной стены и на дне у наветренной стены.

Литература

1. Nuterman R., Starchenko A., Balkanov A. Numerical Model of Urban Aerodynamics and Pollution Dispersion // International Journal of Environment and Pollution. – 2011. – С. 385–393.
2. Старченко А.В., Нутерман Р.Б., Данилкин Е.А. Численное моделирование турбулентных течений и переноса примеси в уличных каньонах. Томск: Изд. дом Томского гос. ун-та, – 2015. – 252 с.
3. Данилкин Е.А., Старченко А.В. Моделирование распространения выбросов автомобильного транспорта в уличном каньоне. Вычислительные технологии. – 2020. – С. 4–21.

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ОТЛАДКА ФРАГМЕНТИРОВАННЫХ ПРОГРАММ В СИСТЕМЕ LUNA

А.Ю. Власенко, М.А. Мичуров

Новосибирский государственный университет

В ИВМиМГ СО РАН разрабатывается система фрагментированного программирования LuNA (Language for Numerical Algorithms) [1]. Основная цель разработки - предоставление прикладному программисту инструментария создания вычислительных программ, пригодных для запуска на параллельных компьютерах с общей и распределенной памятью. При этом пользователь избавляется от необходимости решения таких проблем параллельного программирования, как явное распределение вычислительной работы по ветвям параллельного приложения; балансировка нагрузки; поиск гонок данных, дедлоков и других ошибок, возникающих вследствие некорректно определенного взаимодействия потоков или процессов. В то же время при создании фрагментированных программ пользователи сталкиваются с другими специфичными ошибками.

Представляемая работа посвящена анализу и классификации ошибок, свойственных фрагментированным программам. Приводятся основные подходы, применяемые при отладке последовательных и параллельных программ [2], и дается анализ их применимости к фрагментированным программам. Излагается принцип действия созданного модуля `luna_trace`, осуществляющего поиск логических ошибок по собранной трассе. Демонстрируются результаты работы `luna_trace` на тестовых программах и приводятся накладные расходы, обусловленные применением данного модуля, на больших вычислительных программах.

Литература

1. Akhmed-Zaki D., Lebedev D., Malyshkin V., Perepelkin V.: Automated Construction of High Performance Distibuted Programs in LuNA System // Malyshkin, V. (ed.) 15th International Conference, PaCT 2019, Almaty, Kazakhstan, August 19-23, 2019. pp. 3–9.
2. Афанасьев К.Е., Власенко А.Ю. Автоматизированный анализ корректности MPI-программ на основе определенных пользователем шаблонов ошибочного поведения // Вестник Томского Государственного Университета. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика. №1 (26), 2014. С. 75-83.

TRACE-BASED AUTOMATIC PERFORMANCE OPTIMIZATION IN LUNA PROGRAMS

V.A. Perepelkin, M.I. Ivanov

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, SB RAS, Novosibirsk

Tracing (journaling) of distributed programs execution is a source of detailed information on performance, which potentially can be used to improve efficiency (i.e. reduction of execution time, memory consumption, network load, and so on). In systems for parallel programs automatic construction both the tracing process and trace-based efficiency optimization can be automated. In the work we consider such means in LuNA [1] system for automatic parallel programs construction. LuNA program has a fragmented structure, which is basically a set of informationally dependent tasks called computational fragments (CF), and this structure is preserved in run-time. This allows to trace (log) all the timings and events, related to computational fragments: the order and duration of CFs execution, as well as the node on which each CF was executed. Once the information is obtained the system is able to construct a particular distributed program, which repeats the execution of all CFs in the same way they were originally executed by LuNA. Such particular program is free from various run-time system overhead, related to decision making, distributed objects search, garbage collection, etc., which makes it more efficient. The approach is experimentally investigated on the example of a numerical simulation of filtration process of a two-phase incompressible fluid [2].

References

1. Victor E. Malyshkin, Vladislav A. Perepelkin. LuNA Fragmented Programming System, Main Functions and Peculiarities of Run-Time Subsystem // Parallel Computing Technologies. 11th International Conference, PaCT 2011, Proceedings. LNCS 6873. Springer, 2011. pp. 53-61.
2. M. I. Ivanov, I. A. Kremer, Yu. M. Laevsky, "On the streamline upwind scheme of solution to the filtration problem", Sib. Elektron. Mat. Izv., 16 (2019), 757–776.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОЦЕНКИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ МАСШТАБИРУЕМЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ ПРИ ГРУППОВОМ ВОССТАНОВЛЕНИИ

К.В. Павский^{1,2}, В.А. Павский³

¹ИФП СО РАН, г. Новосибирск,

²СибГУТИ, г. Новосибирск,

³Кемеровский государственный университет, г. Кемерово.

Увеличение числа вычислительных узлов в масштабируемых вычислительных системах (ВС) повышает риск возникновения отказов. Анализ потенциальных возможностей и надежности таких систем является актуальной задачей. В работе предлагается математическая модель для расчета показателей надежности масштабируемых вычислительных систем с резервом и групповым восстановлением отказавших машин.

Построение модели основано на методах Теории массового обслуживания [1]. Рассматривается система массового обслуживания (СМО), на которую поступает пуассоновский поток требований (соответствует отказам) с заданной интенсивностью. Время обслуживания группы из r требований подчинено экспоненциальному распределению. В каждый момент времени СМО находится в одном из множества несовместных состояний, соответствующих числу исправных машин в системе. Формализация схемы отказов и восстановлений отказавших машин представлено в виде дифференциальных уравнений для вероятностей состояний ВС. На основе общего вида решения получены аналитические решения для оценки размера резерва и функции распределения времени нахождения ВС в состоянии низкой производительности при групповом восстановлении.

Исследования выполнены в рамках ГЗ 0242-2021-0011 и при поддержке РФФИ (грант № 20-07-00039).

Литература

1. Саати, Т.Л. Элементы теории массового обслуживания и ее приложения. [Текст] / Т.Л. Саати – Изд. 3-е. – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. – 520 с.

БИБЛИОТЕКА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ, СПОСОБНЫХ РЕАГИРОВАТЬ НА ИЗМЕНЕНИЯ В ДОСТУПНОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ

М.А. Городничев^{1,2,3}, А.А. Нестёркина³

¹Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

²Новосибирский государственный университет

³Новосибирский государственный технический университет

Обычная практика выполнения параллельных задач на суперкомпьютерах заключается в том, что программа не стартует, пока для нее не будет освобожден заданный объем вычислительных ресурсов (узлов, ядер и т.п.). А пока не завершатся все процессы программы, ресурсы не высвобождаются. По мере высвобождения от предыдущих задач ресурсы простаивают в ожидании набора полного объема и в конце расчетов, когда процессы параллельной программы один за другим завершают свою работу. Существуют техники снижения простоев, но общий принцип сохраняется: долгие годы.

Предлагается организация параллельной программы, в которой возможно начинать вычисления, как только становится доступным некоторый минимально необходимый объем ресурсов, а дополнительные ресурсы вводятся в работу по мере их освобождения от предыдущих задач. Освобождение ресурсов возможно по частям.

Проблемы системного программирования, связанные с реализацией такой модели: требуется обнаруживать изменения в доступности ресурсов, проводить перераспределение вычислений, обеспечивать отказоустойчивость программ. Для поддержки разработки прикладных программ решение этих проблем должно быть вынесено в библиотеки. Разработан модельный пример библиотеки для реализации трафаретных вычислений.

АЛГОРИТМЫ БАРЬЕРНОЙ СИНХРОНИЗАЦИИ ДЛЯ NUMA-СИСТЕМ

Е.И. Токмашева, М.Г. Курносов

Увеличение числа процессорных ядер на одном вычислительном узле привело к широкому распространению NUMA-архитектуры. В таких системах время доступа к памяти зависит от размещения процессорного ядра – обращение к памяти своего процессора выполняется через его ло-

кальный контроллер, а доступ к памяти другого процессора требует перехода по межпроцессорной шине.

В данной работе рассматривается задача оптимизации времени выполнения барьерной синхронизации процессов MPI-программ в пределах одной многопроцессорной NUMA-системы с общей памятью. На базе библиотеки Open MPI авторами реализован компонент с алгоритмами барьерной синхронизации: глобальный счетчик, плоское дерево, плоское дерево gather/release, объединяющее дерево (combining tree), MCS-барьер, турнирный алгоритм (tournament), рассеивающий (dissemination), которые основаны на использовании счетчиков и флагов в сегменте разделяемой памяти. В работе предложен алгоритм динамического выбора процесса, в памяти NUMA-узла которого размещаются совместно используемые флаги и счетчики алгоритмов барьерной синхронизации. Корневым выбирается процесс, суммарное расстояние от NUMA-узла которого до NUMA-узлов всех остальных процессов минимально. Экспериментально показано, что разработанный алгоритм позволяет сократить на 10-35% время алгоритмов Barrier на асимметричных подсистемах процессорных ядер.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ

Е.А. Каратаева, Е.А. Шельмина

Томский государственный университет

Проблема охраны окружающей среды – одна из важных задач науки. Постоянный контроль качества воздуха позволит обеспечить безопасный уровень воздействия на атмосферу [1].

В представленной работе рассматривается обратная задача переноса примеси: известны значения концентрации примеси, измеренные в нескольких контрольных точках, требуется найти тип, координаты и мощность её источников.

Задача решается с использованием аппарата сопряженных уравнений [2]. Численное решение основных и сопряженных уравнений может быть реализовано одними и теми же алгоритмами, поскольку дифференциальный оператор сопряженной задачи имеет схожую структуру с оператором прямой задачи.

Для численного решения выбрана противопотоковая схема UPWIND. При использовании для адвективных членов уравнения схемы против потока предполагается, что значение функции на грани конечного объема рассчитывается по значению функции в узле, находящемся с «подветренной» стороны.

Литература

1. Панасенко Е.А. Численное решение некоторых обратных задач с различными типами источников атмосферного загрязнения / Е.А. Панасенко, А.В. Старченко // Вестник ТГУ. Механика и математика. – 2008. – № 2(3). – С.47 – 56.
2. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г.И. Марчук. – М.: Наука, 1982. – 315 с.

СОДЕРЖАНИЕ

В.Г. Борисов, Ю.Н. Захаров, Р.А. Виноградов, В.П. Дербилова, Ю.И. Шокин, В.В. Матусевич, Т.И. Капран, П.С. Онищенко, А. Н. Казанцев	
ЦИФРОВАЯ МОДЕЛЬ КАРОТИДНОЙ ЭНДАРТЕРАТОМИИ	8
В.М. Зюзьков ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА	9
М.А. Толстых, Р.Ю. Фадеев, В.В. Шашкин, С.В. Травова, Г.С. Гойман, К.А. Алипова РАЗВИТИЕ МНОГОМАСШТАБНОЙ ГЛОБАЛЬНОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРЫ ПЛАВ	10
Б.М. Шумилов О МЕТОДЕ ОБРАТНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ И РАСЩЕПЛЕНИИ СПЛАЙН-ВЕЙВЛЕТОВ	11
В.Н. Берцун О КРАТНОМАСШТАБНОМ ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗЕ СЕТОЧНЫХ ФУНКЦИЙ.....	12
А.В. Паничкин ИССЛЕДОВАНИЕ ТОЧНОСТИ КОНЕЧНО- РАЗНОСТНЫХ СХЕМ С АЛГОРИТМОМ УМЕНЬШЕНИЯ СХЕМНОЙ ВЯЗКОСТИ ПРИ ЧИСЛЕННОМ РАСЧЕТЕ ДВУХМЕРНЫХ СТРУЙНЫХ ТЕЧЕНИЙ ЖИДКОСТИ.....	13
Е.К. Куликов, А.А. Макаров О МЕТОДАХ ЛОКАЛЬНОЙ АППРОКСИМАЦИИ МИНИМАЛЬНЫМИ СПЛАЙНАМИ.....	13
А.В. Старченко, Е.А. Данилкин, С.А. Проханов, Д.В. Лещинский РАЗРАБОТКА ГИБРИДНОЙ СХЕМЫ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ МЕЗОМАСШТАБНОЙ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРНОГО ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ.....	14
К.Н. Ефимов, В.А. Овчинников, А.С. Якимов ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЕРЕМЕННОГО УГЛА АТАКИ НА СОПРЯЖЕННЫЙ ТЕПЛОМАССОБМЕН ПРИ ПРОСТРАНСТВЕННОМ ОБТЕКАНИИ СФЕРИЧЕСКИ ЗАТУПЛЕННОГО КОНУСА.....	15
М.А. Городничев, П.Д. Рудыч ПРИМЕНЕНИЕ ПЛАТФОРМЫ HPC COMMUNITY CLOUD ДЛЯ СОЗДАНИЯ СЕРВИСА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ЭЭГ	16
А.Э. Ни ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ГИБРИДНОЙ МЕЗОМАКРОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ НА GPU	17
А.В. Старченко, Е.А. Данилкин, С.А. Проханов, Д.В. Лещинский ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В МЕЗОМАСШТАБНОЙ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРНОГО ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ.....	18
Ю.Н. Захаров, С.В. Стуколов МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКРУТКИ ПОТОКА ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ В СИСТЕМАХ ОТОПЛЕНИЯ	19

И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЙ ПЕРЕНОСНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕДАХ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА МИКРОПРОЦЕССОВ	19
Roman Nuterman, Dion Häfner, and Markus Jochum GENERAL CIRCULATION MODELLING IN PYTHON ON CPU AND GPU	20
В.И. Зинченко, В.Д. Гольдин, В.И. Лаева РАСЧЕТ СОПРЯЖЕННОГО НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕПЛООБМЕНА ЗАТУПЛЕННЫХ ТЕЛ ПРИ ИХ СВЕРХЗВУКОВОМ ОБТЕКАНИИ.....	21
П.Л. Новиков, А.В. Двуреченский, К.В. Павский ПОСТРОЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО РЕЛЬЕФА СТРУКТУРИРОВАННОЙ ПОДЛОЖКИ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.....	22
A.V. Snytnikov, A.M. Pukhov, A.A. Romanenko, M.M. Lavrientiev GPU IMPLEMENTATION OF THE Q-VLPL3D PLASMA SIMULATION CODE	22
Е.И. Гурина МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ РАСЧЕТА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ ОСЕВЫХ ВЕНТИЛЯТОРОВ	23
И.А. Ботыгин, В.С. Шерстнёв, А.И. Шерстнёва ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ЯЗЫКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ R ДЛЯ ОБРАБОТКИ БОЛЬШИХ ДАННЫХ	24
А.Н. Хамидов ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТИПА ХИЩНИК—ЖЕРТВА С УЧЕТОМ ПОИСКОВОГО ПОВЕДЕНИЯ ХИЩНИКА	25
И.В. Дель, А.В. Старченко ПРОГНОЗ ПРИЗЕМНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ВОЗДУХА НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ РЕКУРРЕНТНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ТИПА LSTM.....	25
Д.В. Лещинский, Е.А. Данилкин ВЛИЯНИЕ РАСПОЛОЖЕНИЯ ИСТОЧНИКА ЗАГРЯЗНЕНИЯ НА КОНЦЕНТРАЦИЮ ПРИМЕСИ В УЛИЧНОМ КАНЬОНЕ	27
А.Ю. Власенко, М.А. Мичуров АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ОТЛАДКА ФРАГМЕНТИРОВАННЫХ ПРОГРАММ В СИСТЕМЕ LUNA.....	28
V.A. Perepelkin, M.I. Ivanov TRACE-BASED AUTOMATIC PERFORMANCE OPTIMIZATION IN LUNA PROGRAMS	29
К.В. Павский, В.А. Павский МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОЦЕНКИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ МАСШТАБИРУЕМЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ ПРИ ГРУППОВОМ ВОССТАНОВЛЕНИИ	30
М.А. Городничев, А.А. Нестёркина БИБЛИОТЕКА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ, СПОСОБНЫХ РЕАГИРОВАТЬ НА ИЗМЕНЕНИЯ В ДОСТУПНОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ ..	31

Е.И. Токмашева, М.Г. Курносов АЛГОРИТМЫ БАРЬЕРНОЙ СИНХРОНИЗАЦИИ ДЛЯ NUMA-СИСТЕМ	31
Е.А. Каратаева, Е.А. Шельмина ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ	32

Научное издание

Десятая Сибирская конференция по параллельным и
высокопроизводительным вычислениям

Программа и тезисы докладов
(5 – 7 октября 2021 года)