

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЙ УРОВЕНЬ

- Архитектура вычислительных систем
- Программирование многопоточных приложений
- Технология OpenMP
- Программирование в рамках стандарта MPI
- Пакет визуализации научных данных ParaView
- Построение геометрии и генерация сеток
- Вычислительная библиотека PETSc
- Вычислительный пакет FEniCS



URSS

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Профессиональный уровень

Под редакцией
доктора физико-математических наук
П. Н. Вабищевича



URSS
МОСКВА

ББК 22.18 22.19 22.1п 32.811 32.973–018

Вычислительные технологии: Профессиональный уровень /
Под ред. П. Н. Вабищевича. — М.: ЛЕНАНД, 2017. — 352 с.

Прикладные модели базируются на краевых задачах в сложных расчетных областях для систем нелинейных, нестационарных уравнений с частными производными. Современные высокопроизводительные вычисления проводятся на параллельных компьютерах.

Особенности многоядерных компьютеров (многопроцессорных систем с общей памятью) учитываются в технологии программирования с использованием OpenMP. Параллельное программирование для кластеров и суперкомпьютеров (системы с распределенной памятью) проводится на основе MPI (Message Passing Interface). Для численного решения линейных и нелинейных систем уравнений, систем обыкновенных дифференциальных уравнений, к которым мы приходим после дискретизации краевых задач для уравнений с частными производными, предназначена библиотека PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation). Все основные компоненты современных инженерных и научных вычислений (геометрическая и сеточная модели, конечно-элементная аппроксимация, решение дискретных задач и визуализация расчетных данных) представлены в пакете FEniCS.

Книга рассчитана на студентов университетов и вузов, обучающихся по специальности «Прикладная математика», и специалистов по вычислительной математике и математическому моделированию.

Формат 60×90/16. Печ. л. 22. Зак. № АЛ-388.

Отпечатано в ООО «ЛЕНАНД».
117312, Москва, пр-т Шестидесятилетия Октября, 11А, стр. 11.

ISBN 978-5-9710-4089-7

© ЛЕНАНД, 2016

21283 ID 222044



9 785971 040897



Все права защищены. Никакая часть настоящей книги не может быть воспроизведена или передана в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами, будь то электронные или механические, включая фотокопирование и запись на магнитный носитель, а также размещение в Интернете, если на то нет письменного разрешения владельца.

Оглавление

<i>Предисловие</i>	7
<i>Введение</i>	10
1 Архитектура вычислительных систем	13
1.1 История развития вычислительной техники	13
1.2 Архитектура параллельных систем	14
1.3 Современные суперкомпьютеры	17
1.4 Многоядерные вычислительные системы	19
1.5 Процессы и потоки в многозадачных операционных системах	19
1.6 Особенности программирования	22
2 Программирование многопоточных приложений	24
2.1 Библиотека POSIX threads	24
2.2 Создание и уничтожение потоков	25
2.3 Жизненный цикл потока	28
2.4 Многопоточная реализация операции сложения матриц	29
2.5 Синхронизация работы потоков	34
2.6 Правила видимости памяти	43
2.7 Заключение	45
3 Технология OpenMP	47
3.1 Модель OpenMP	48
3.2 Общие директивы и опции OpenMP	53
3.3 Директивы разделения работы	57
3.4 Опции директив разделения работы	67
3.5 Директивы синхронизации	77
3.6 Дополнительные опции и директивы OpenMP	85
3.7 Решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона	92
4 Программирование в рамках стандарта MPI	101
4.1 Основы программирования в рамках стандарта MPI	102

4		
4.2	Операции передачи сообщений	108
4.3	Функции коллективного взаимодействия	113
4.4	Решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона	130
5	Пакет визуализации научных данных ParaView	139
5.1	Краткое описание	139
5.2	Форматы данных	140
5.3	Подготовка расчетных данных	144
5.4	Основы работы с ParaView	152
5.5	Параллельная визуализация в ParaView	159
6	Инструментарий для разработки параллельных программ	164
6.1	Установка	164
6.2	Работа с проектом	165
6.3	Отладка параллельной программы	182
6.4	Анализ производительности	185
7	Прикладное программное обеспечение	190
7.1	Численное моделирование	190
7.2	Программный инструментарий	194
7.3	Структура программного комплекса	196
7.4	Универсальное прикладное программное обеспечение	199
7.5	Проблемно-ориентированные программные комплексы	202
8	Построение геометрии и генерация сеток	206
8.1	Общие сведения	206
8.2	Gmsh	209
8.3	NETGEN	228
9	Вычислительная библиотека PETSc	232
9.1	Общая информация	232
9.2	Решение линейной задачи	244
9.3	Решение нелинейных задач	252
9.4	Решение нестационарной задачи	261
10	Вычислительный пакет FEniCS	270
10.1	Общая информация	270
10.2	Модельная краевая задача	272
10.3	Конечно-элементная аппроксимация	274
10.4	Программа	277
10.5	Обработка результатов	285

10.6	Нелинейная задача	289
10.7	Нестационарная задача	295
11	Численное исследование прикладных проблем	302
11.1	Теплоперенос в грунте при наличии фазовых переходов	302
11.2	Течение несжимаемой жидкости	314
11.3	Задача стационарной термоупругости	325
11.4	Теплоэлектрическая модель	336
<i>Список литературы</i>		350