

О РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИИ ВЫЧИСЛЕНИЙ В КОМПЬЮТЕРНЫХ МОДЕЛЯХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНСТРУМЕНТОВ WOLFRAM MATHEMATICA

В. Б. Таранчук, В. В. Таранчук

Кафедра компьютерных технологий и систем, Факультет прикладной математики и информатики,
Белорусский государственный университет,

НИИ прикладных проблем математики и информатики Белорусского государственного университета
Минск, Республика Беларусь

E-mail: taranchuk@bsu.by, victoria_t@mail.by

Обсуждаются вопросы организации параллельных вычислений при разработке компьютерных моделей и соответствующие инструменты системы компьютерной алгебры Wolfram Mathematica.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время достаточно распространены разные компьютерные модели физических явлений и процессов. Классов таких моделей несколько, но наиболее точными являются теоретические, которые создаются на основе математических представлений, систем дифференциальных уравнений в частных производных, начальных и граничных условий, получаемых из фундаментальных законов физики и химии. Именно такие модели описывают развитие с учетом имеющих место индивидуальных для каждого конкретного процесса внешних факторов, текущего состояния и взаимовлияния составляющих, неоднородностей, других параметров, характеризующих конкретику окружения и описываемых объектов. Прогноз при использовании теоретических моделей даётся не с определенной вероятностью, а с точностью модели.

Развитие теоретических моделей предполагает математическое описание, разработку численного метода решения соответствующих краевых задач, многовариантные расчёты. В теоретических моделях системы дифференциальных уравнений, описывающие процессы с высоким уровнем адекватности, являются нелинейными, коэффициенты переменными. Аналитическое исследование теоретических моделей даёт только эталонные решения, и в лучшем случае может использоваться для изучения качественных изменений параметров процессов. Количественные характеристики для практических приложений удаётся получать только при решении задач в постановках, учитывающих нестационарность, многомерность, нелинейности, ряд других осложняющих особенностей — удовлетворение таких требований возможно только при применении численных методов. Расчёты приближенных решений краевых задач, обычно, даже в одномерных случаях трудоёмки и продолжительны, особенно много машинного времени они требуют в многомерных случаях.

Поэтому чрезвычайно важным является распараллеливание вычислений. Как это делать, теоретически понятно, т.к. в большинстве под-

ходов численного решения основными являются явные аппроксимации, метод расщепления по физическим процессам, квазилинеаризация в пределах каждого временного слоя. Согласно такому подходу, расчёты на каждом временном слое сеточных функций (распределений параметров) можно проводить независимо.

Программная реализация алгоритмов параллельных вычислений является отдельной, сложной технической задачей. Важный вопрос — как с минимальными затратами на доработку программных комплексов использовать возможности ускорения расчётов на многопроцессорных вычислительных машинах, многоядерных персональных компьютерах. Существующие средства программирования на языках высокого уровня алгоритмов с параллельными вычислениями таковы, что для их использования необходим высокий уровень подготовки, за пределами знаний обычного пользователя-вычислителя. С другой стороны, давно доступны мощные системы компьютерной математики и компьютерной алгебры [1]; большинство из них включают инструменты организации параллельных вычислений.

I. ИНСТРУМЕНТЫ Mathematica для РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Программирование методов приближенно-го решения, сервисные средства проведения вычислительных экспериментов и создания базы данных рассчитываемых сценариев развития процессов в теоретических моделях могут быть эффективно реализованы в системе компьютерной алгебры Wolfram Mathematica([2]), в том числе с использованием программных модулей CDF формата и их выполнением под свободно распространяемым CDF Player [3, 4]. Благодаря встроенным командам, система при применении пользователем соответствующих функций к собственному вычислительному коду автоматически распределяет задачи по доступным, в том числе удалённым, процессорам, используя всё имеющееся оборудование (многоядерных систем или локальных сетей). В Mathematica поддерживаются все известные концепции параллельных

вычислений, распараллеливание действует в любой компьютерной сети, под управлением Unix, Linux, Windows, Mac OS X, и требует только лишь протокол связи TCP/IP между машинами.

Параллельные вычисления в *Mathematica* основаны на запуске нескольких ядер и их контроле. Отметим основные возможности параллельных вычислений в системе: платформонезависимость; поддержка параллельного функционального программирования и автоматического распараллеливания; распределенная память, параллелизм мастера и ведомого; виртуальная разделяемая память, синхронизация, блокировка; автоматическое перераспределение процессов на отказавших удаленных компьютерах; скрывание задержек; восстановление после сбоя; обмен символьными выражениями и программами с удаленными ядрами; гетерогенные сети, мультипроцессорные системы, LAN, WAN; планировщик виртуальных процессов, явное распределение процессов для доступных процессоров.

Приведём основные функции и настройки *Mathematica*, которые можно использовать при реализации вычислений с распараллеливанием:

- `$ProcessorCount` – выводит число доступных процессоров;
- `$ConfiguredKernels` – список ядер по умолчанию, настроенных для удаленных или параллельных вычислений;
- `LaunchKernels[n]` – запускает на данном компьютере n локальных «псевдоядер» (`subkernels`);
- `$KernelCount` – выводит число доступных для параллельных вычислений `subkernels` («псевдоядер», таковые назначают функцией `LaunchKernels`);
- `CloseKernels[]` – завершает (закрывает) все параллельные ядра («псевдоядра») из списка `Kernels[]`;
- `ParallelEvaluate[expr]` – вычисляет выражение `expr` на всех доступных параллельных ядрах и возвращает список результатов;
- `Parallelize[expr]` – вычисляется выражение `expr`, используя автоматическое распараллеливание;
- `DistributeDefinitions[s1,s2,...]` – распределяет все вычисления для выражений `si` по доступным параллельным ядрам (обязательна, чтобы параллельные ядра знали функцию, которую они будут вычислять, так как изначально каждая определена только в мастер-ядре);
- `ParallelCombine[f,h[e1,e2,...],comb]` – производит параллельные расчеты суперпозиции функций `f[h[e1,e2,...]]`, распределяя части по всем ядрам, и комбинирует все результаты в выражении `comb`;
- `ParallelEvaluate[expr,ker1,ker2,...]` – производит параллельные расчеты выражения `expr` на перечисленных ядрах;
- `ParallelTry[f,arg1,arg2,...,k]` – возвращает вычисленный в параллельном режиме список первых k результатов;

- `ParallelMap[f,expr]` – параллельно применяет функцию `f` для каждого элемента на первом уровне в `expr`;
- `ParallelNeeds[«context»]` – вычисляет потребности «context» для доступных ядер;
- `ParallelSubmit[expr]` – поместить `expr` в очередь вычисления на параллельных ядрах;
- `EvaluationObject[n,expr,...]` – указывает выражение `expr`, отправленное параллельным ядрам;
- `ParallelTable[expr,imax]` – параллельно генерирует список `imax` копий выражений `expr`;
- `ParallelSum[expr,i,imax]` – производит параллельный расчет суммы.

II. ПРИМЕР

Проиллюстрируем эффекты применения упомянутых функций на простом и понятном примере. Рассмотрим вычисление суммы i^3 по i от 1 до $iEnd$, два варианта кода:

```
Sum[N[i^3], i, 1, iEnd]
```

и

```
Parallelize[Sum[N[i^3], i, 1, iEnd]].
```

Отличие только в том, что во втором варианте добавлена функция `Parallelize`. Расчёты на 2-х, 4-х ядерных компьютерах дают коэффициенты сокращения времени расчёта, почти по числу ядер. Например, на HP Pavilion dv9000, процессор AMD Turion 64X2 Mobile Technology TL-56 (2-х ядерный 1,8 ГГц) расчёт по вариантам без и с `Parallelize` для `iEnd = 5000000` занимает соответственно 32,2 и 17,9 секунд; для `iEnd = 10000000` 64,6 и 35,6 секунд.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Знание и использование стандартных функций системы Wolfram *Mathematica* позволяет фактически без изменения кода в ряде случаев заметно сократить время расчётов путём использования встроенных функций распараллеливания.

1. Таранчук, В. Б. Основные функции систем компьютерной алгебры : пособие для студентов фак. прикладной математики и информатики / В. Б. Таранчук // – Минск : БГУ, 2013. – 59 с.
2. Wolfram *MATHEMATICA*. Наиболее полная система для современных технических вычислений в мире [Электронный ресурс] / Режим доступа: <http://www.wolfram.com/mathematica>. – Дата доступа: 8.09.2015.
3. CDF. Формат вычисляемых документов – Документы оживают благодаря возможностям вычислений. [Электронный ресурс] / Режим доступа: <http://www.wolfram.com/cdf>. – Дата доступа: 8.09.2015.
4. Таранчук, В. Б. О создании интерактивных образовательных ресурсов с использованием технологий Wolfram. / В. Б. Таранчук // Информатизация образования. – 2014. – № 1. – С. 78–89.