



CUDA<sup>®</sup> АЛЬМАНАХ  
ОКТЯБРЬ 2013



## СОДЕРЖАНИЕ

Что такое CUDA Альманах?

Новости NVIDIA CUDA

Предложения от NVIDIA

Избранные научные работы  
с использованием вычислений на CUDA

Контакты и полезные ссылки

ТРЕХМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНЫХ СИСТЕМ ТИПА ЖИДКОСТЬ-ПАР  
МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА НА GPU

А. Л. Куперштох

О РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИИ ДАКТИЛОСКОПИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ

С.Ю. Сартасов

ОПТИМИЗАЦИЯ РАСЧЕТОВ В ПАКЕТЕ OPENFOAM НА GPU

А. В. Монаков

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ ФИЛЬТРАЦИИ НА ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ  
Д.Н. Морозов, М.А. Трапезникова, Б.Н. Четверушкин, Н.Г. Чурбанова

ПРОГНОЗ ДИНАМИКИ ЗАТОПЛЕНИЯ ТЕРРИТОРИЙ В ПЕРИОД ЛИВНЕВОГО ПАВОДКА  
НА ОСНОВЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Татьяна Дьяконова

УСКОРЕНИЕ РЕШАТЕЛЕЙ SLAM С ПОМОЩЬЮ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ

В.Л. Якушев, А.В. Филимонов, П.Ю. Солдатов

РАЗРАБОТКА СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЙ ТЕХНОЛОГИИ В ИНТЕРЕСАХ ИНСПЕКЦИИ  
ЯДЕРНЫХ ПОЛИГОНОВ И РЕАЛИЗАЦИИ ПЕРЕСТАНОВОЧНОГО ТЕСТА В ГЕНЕТИКЕ

А. А. Якименко

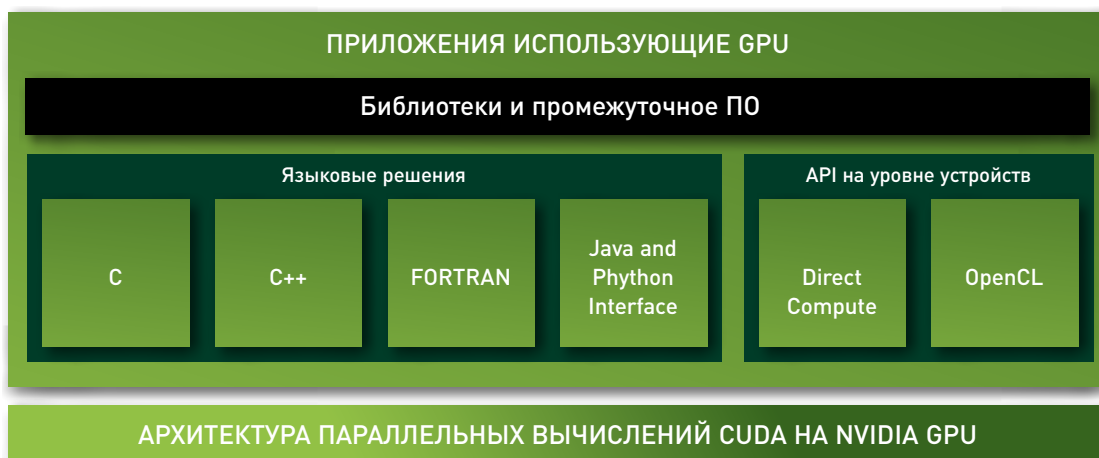
## ЧТО ТАКОЕ CUDA АЛЬМАНАХ?

CUDA АЛЬМАНАХ – это периодическое издание от NVIDIA, содержащее научные работы, в которых используется архитектура параллельных вычислений CUDA.

CUDA используется в различных областях, включая обработку видео и изображений, вычислительную биологию и химию, моделирование динамики жидкостей, восстановление изображений, полученных путем компьютерной томографии, сейсмический анализ, трассировку лучей и многое другое.

Приложения, базирующиеся на архитектуре CUDA, можно разрабатывать на различных языках и API, включая C, C++, Fortran, OpenCL и directCompute. Архитектура CUDA подразумевает сотни ядер, способных исполнять тысячи параллельных потоков, а модель программирования CUDA позволяет программистам сосредоточиться на распараллеливании своих алгоритмов.

Архитектура CUDA текущего поколения под названием Kepler – это самая передовая архитектура вычислений на GPU. Построенные на свыше семи миллиардов транзисторах, GPU Kepler делают универсальными вычисления на GPU и CPU для широкого спектра вычислительных приложений. Поддержка C++ упрощает разработку ПО для параллельных вычислений и повышает производительность широчайшего спектра приложений.

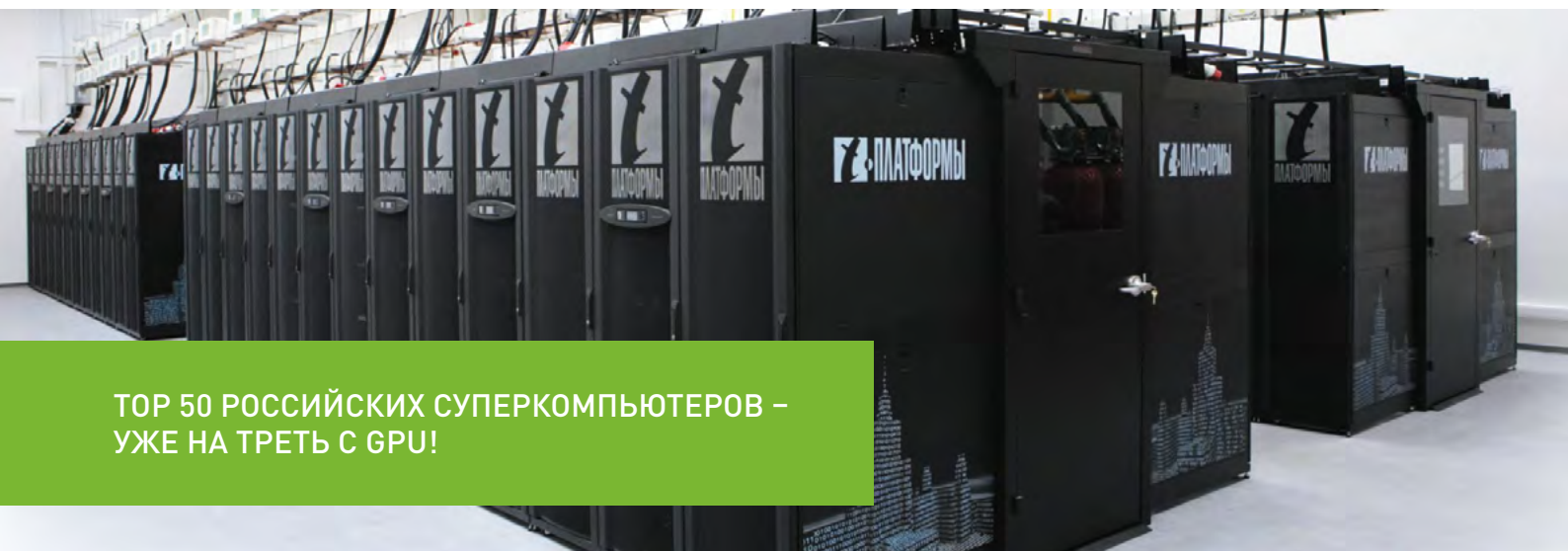


Архитектура параллельных вычислений CUDA с комбинацией ПО и аппаратной части.

Всего за несколько лет вокруг архитектуры CUDA возникла целая экосистема программного обеспечения – от различных языковых решений до широкого спектра библиотек, компиляторов и связующего ПО, которые помогают пользователям оптимизировать приложения для GPU. Разнообразие оптимизированных программных средств ускоряет научные открытия и расчет моделей во многих областях, включая математику, бионауки и производство.

[Узнать подробнее](#)

## НОВОСТИ NVIDIA CUDA

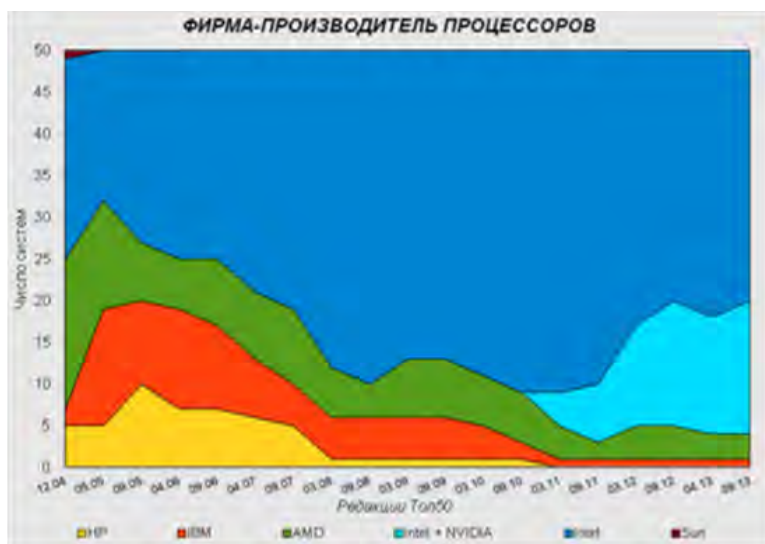


ТОР 50 РОССИЙСКИХ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ –  
УЖЕ НА ТРЕТЬ С GPU!

Опубликована новая, 19-я редакция рейтинга [ТОР 50 самых быстрых суперкомпьютеров России](#).

Количество систем, построенных на гибридных платформах (CPU + GPU), продолжает расти. Согласно данным рейтинга, 16 систем из 50 построены с использованием графических процессоров NVIDIA. Причем решения на базе связки Intel CPU + NVIDIA GPU – это единственная категория суперкомпьютеров, демонстрирующая стабильный рост.

Самой быстрой системой остается суперкомпьютер «Ломоносов», установленный в МГУ им. М.В. Ломоносова, с пиковой производительностью 1.7 Петафлопс. Возможностями суперкомпьютерного комплекса Московского университета сегодня пользуются более 500 научных групп, представляющих все основные подразделения МГУ, многие институты РАН и другие научные учреждения России.



МОСКОВСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ М.В.ЛОМОНОСОВА

## ГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССОРЫ УСКОРЯЮТ ПОШИВ ПЛАЩА-НЕВИДИМКИ



Неожиданная сфера применения графических процессоров NVIDIA – ускорение моделирования невидимых материалов. Эти так называемые «метаматериалы» (metamaterials) пока существуют только в проекте благодаря усилиям физика-теоретика Сэра Джона Пендри (John Pendry) из Лондонского Имперского Колледжа.

Идея уже вызвала восторг у Атики Дэвуда (Attique Dawood), преподавателя Государственного Университета Информатики и Новых Наук в Исламабаде. Другие заинтригованы не меньше.

### УВЕЛИЧИТЬ КРОШЕЧНЫЕ ОБЪЕКТЫ ИЛИ СКРЫТЬ ОБЪЕКТЫ ВООБЩЕ

Плащ-невидимка совсем скоро может стать реальностью. Разрабатываемые метаматериалы смогут использоваться для отклонения света от объекта, что позволит этому объекту исчезнуть из зоны видимости наблюдателя. Такой фокус встречается во многих книгах и фильмах, например: в «Гарри Поттере», «Звездном Пути» и «Властелине Колец».



Их также можно использовать для создания линз, которые позволяют видеть объекты, размеры которых меньше, чем длина волны света. Такие линзы позволят исследователям наблюдать за объектами, не видимыми невооруженным глазом.

«Метаматериалы предлагают целый мир новых возможностей, при этом невидимость – лишь только одна из них! – говорит Атик. – Более эффективные и компактные антенны, суперлинзы и структуры, способные на удивительные вещи».

Все эти идеи существуют давно, но пока только на бумаге. Г-н Пендри, создатель этого направления в науке, уже смоделировал невидимые материалы. А команда китайских ученых развила идею еще глубже и смоделировала материалы, которые позволяют наблюдателю смотреть сквозь них, оставаясь при этом невидимым для противоположной стороны.

Основная проблема всех этих проектов – вычислительные ресурсы. Для моделирования таких материалов требуется огромная вычислительная мощь. По словам г-на Дэвуда, даже на простую модель может уйти много часов при использовании таких научных инструментов, как MatLab.

## ВНЕЗАПНОЕ ИСЧЕЗНОВЕНИЕ

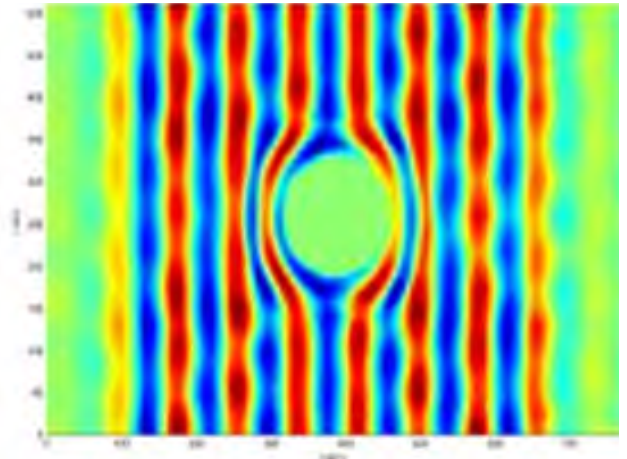
Создание материалов, которые способны менять траекторию лучей света, может спровоцировать создание совершенно новых материалов.

Заядлый геймер Аттик Дэвуд, в свободное время занимающийся продвижением игрового проекта с открытым исходным кодом, обратился к технологии CUDA и графическим процессорам NVIDIA, чтобы ускорить работу по созданию метаматериалов.

Дэвуд сфокусировался на двух задачах. Первая – это создание пластины, которая поглощает электромагнитное излучение и не отражает свет.

Вторая еще интереснее – создание цилиндрической мантии, которая заставляет свет огибать ее так, чтобы сделать человека или объект в этом покрове невидимым. Именно эта задача была впервые озвучена и разработана г-ном Пендри.

Аттик Дэвуд обнаружил, что с помощью графических процессоров можно смоделировать траекторию прохождения лучей света над материалами в 10-15 раз быстрее, чем с помощью CPU. Причем, чем больше задача, тем больше выигрыш в скорости ее решения.



## ЖАЖДА СКОРОСТИ

«Долгое ожидание очень выматывает, – говорит Аттик. – Каждый этап моделирования занимает от часа до десяти, в зависимости от размера задачи. Поэтому мое решение изучать CUDA – это, скорее, вынужденная необходимость, чем что бы то ни было еще».

Аттик Дэвуд, который в следующем году планирует начать работать над диссертацией по метаматериалам, хочет построить кластеры на базе GPU и CPU, чтобы сделать процесс моделирования метаматериалов более эффективным.

Такие симуляции очень важны для перехода на следующий уровень – уровень создания реальных вещей. «Это самый трудоемкий этап, и нужно быть абсолютно уверенным в работоспособности проекта перед началом производства», – говорит г-н Дэвуд.

К тому же, если вы нацелены на создание чего-то невидимого, вам нужно иметь абсолютно четкое представление о его поведении до того, как вы его потеряете на фабрике.

[Подробнее](#)

## ПОЛЕЗНЫЕ СОВЕТЫ РАЗРАБОТЧИКАМ: NVPROF – ТВОЙ УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ПРОФАЙЛЕР ДЛЯ GPU

### В CUDA 5 TOOLKIT ПОЯВИЛСЯ НОВЫЙ МОЩНЫЙ ИНСТРУМЕНТ: NVPROF

Nvprof – это консольный профайлер, доступный в Linux, Windows, и OS X. С первого взгляда может показаться, что это всего лишь консольная версия NVIDIA Visual Profiles и NSight Eclipse без графического интерфейса, но это нечто большее – это легковесный профайлер, который работает там, где нет возможности работать с другим инструментарием.

[Подробнее на английском языке](#)



**NVIDIA**  
**CUDA**  
**Pro Tip**

# ПРЕДЛОЖЕНИЯ ОТ NVIDIA

## ВЕБИНАР НА АНГЛИЙСКОМ ЯЗЫКЕ

---

### ACCELERATING FACE-IN-THE-CROWD RECOGNITION WITH GPU TECHNOLOGY

5 ноября

Speaker: Brian Lovell, Stephen Brain, Imagus Technology

## УСКОРЯЙТЕ ВАШИ НАУЧНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ С OPENACC

---

### БЕСПЛАТНАЯ ЛИЦЕНЗИЯ ОТ PGI НА 30 ДНЕЙ

Получив доступ к бесплатной 30-дневной версии компилятора PGI, вы сможете воспользоваться вычислительными мощностями GPU и стандартом программирования OpenACC.

OpenACC – это:

- **Легкость:** простота добавления директив в исходный код своей программы.
- **Открытость:** используйте единый исходный код как для CPU так и для GPU.
- **Мощность:** получите быстрый доступ к вычислительной мощности GPU.



## ПРОВЕДИТЕ ТЕСТ-ДРАЙВ УСКОРИТЕЛЯ TESLA K20 GPU

---

Воспользуйтесь нашим предложением провести простой и бесплатный тест-драйв ускорителей Tesla K20 GPU.

Самые быстрые в мире ускорители Tesla K20 GPU созданы на основе архитектуры Kepler и обеспечивают высокую производительность и энергоэффективность ваших приложений.





# ИЗБРАННЫЕ НАУЧНЫЕ РАБОТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА CUDA

## ТРЕХМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНЫХ СИСТЕМ ТИПА ЖИДКОСТЬ–ПАР МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА НА GPU

А. Л. Куперштох

Сравнительно новый метод решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE) представляет собой дискретную модель сплошной среды. В настоящее время метод LBE вполне может конкурировать с традиционными методами вычислительной гидродинамики, а в некоторых областях (многофазные и многокомпонентные течения) он имеет значительные преимущества. При моделировании фазовых переходов метод LBE представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз. Алгоритм LBE хорошо распараллеливается на большое количество потоковых процессоров в современных графических картах (Graphics Processing Unit, GPU). Приведены примеры трехмерного моделирования спиновальной декомпозиции, разрыва тонких пленок жидкости за счет термокапиллярного эффекта и процесса разрушения тонкостенного жидкого пузыря. Ускорение расчетов достигает 70–90 раз.

[Подробнее](#)

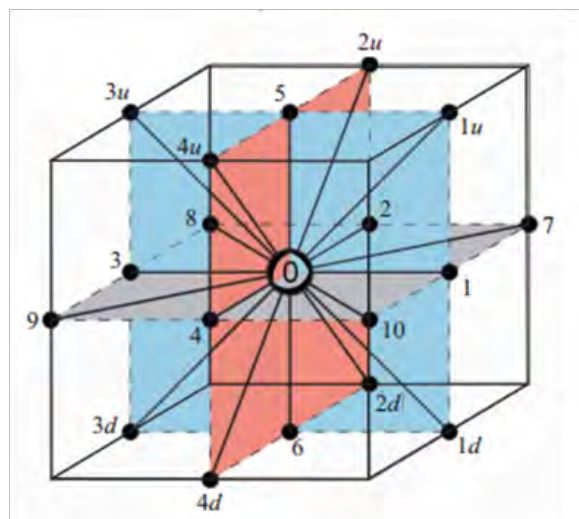


Рис. 1. Возможные векторы скорости частиц в методе решеточных уравнений Больцмана для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19

## О РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИИ ДАКТИЛОСКОПИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ

С.Ю. Сартасов

Задачи дактилоскопической идентификации решаются в различных системах, как в коммерческих, так и в академических. Основным показателем качества системы является качество распознавания отпечатка в терминах False Accept Rate (FAR, коэффициент ложного доступа) и False Reject Rate (FRR, коэффициент ложного отказа доступа). В настоящее время достигнуто такое значение FAR, как , что свидетельствует о высоком уровне развития разрабатываемых биометрических решений.

Вместе с тем практика внедрения идентификационных решений показывает, что качество распознавания не всегда является единственной характеристикой качества всей системы в целом. При построении «электронной проходной» в учреждении немаловажным параметром является также и время идентификации личности, так как длительное распознавание приводит к появлению очередей.

В общей схеме биометрической системы (Рис. 2) мы можем выделить 5 точек, быстродействие в которых влияет на быстродействие всей системы:

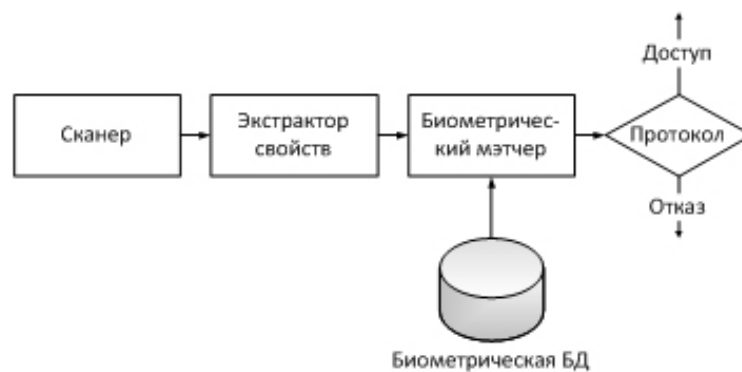


Рис. 2. Общая схема биометрической системы

1. В сканере – захват изображения отпечатка.
2. В линиях связи между сканером и экстрактором свойств.
3. В экстракторе свойств – быстродействие экстрактора.
4. В мэтчере – последовательное сопоставление всех шаблонов базы с предоставленным.
5. В мэтчере – быстродействие алгоритма сопоставления.

[Подробнее](#)

## ОПТИМИЗАЦИЯ РАСЧЕТОВ В ПАКЕТЕ OPENFOAM НА GPU

А. В. Монаков

OpenFOAM — пакет библиотек и программ для организации научных расчётов преимущественно в области вычислительной гидродинамики и механики сплошных сред. Пакет содержит поддержку запуска расчётов на кластере через MPI. Кроме приложений, выполняющих непосредственные расчёты, OpenFOAM содержит вспомогательные программы для подготовки сеток и постобработки результатов.

OpenFOAM содержит несколько десятков программ, выполняющих расчёты в соответствии с различными схемами. Выбор схемы зависит от особенностей решаемой задачи, таких как сжимаемость жидкости, ламинарность потока, способ учёта турбулентности и другие. Примерами этих программ в OpenFOAM являются icoFoam, pisoFoam, interFoam и другие. Обычно запуск этих программ требует наибольшего компьютерного времени в цикле использования OpenFOAM (подготовка сетки – решение – постпроцессинг и визуализация результатов) и поэтому требует тщательной оптимизации.

Большинство этих солверов в процессе своей работы решают множество дифференциальных уравнений на сетке, сводя их к обыкновенным системам линейных алгебраических уравнений над вещественными числами. OpenFOAM содержит лишь небольшое число методов решения СЛАУ. В то же время, для больших задач время решения этих систем может покрывать существенную долю общего времени расчёта. Таким образом, оптимизация методов решения СЛАУ является первоочередным способом повышения производительности OpenFOAM.

[Подробнее](#)

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ ФИЛЬТРАЦИИ НА ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ**

**Д.Н. Морозов, М.А. Трапезникова, Б.Н. Четверушкин, Н.Г. Чурбанова**

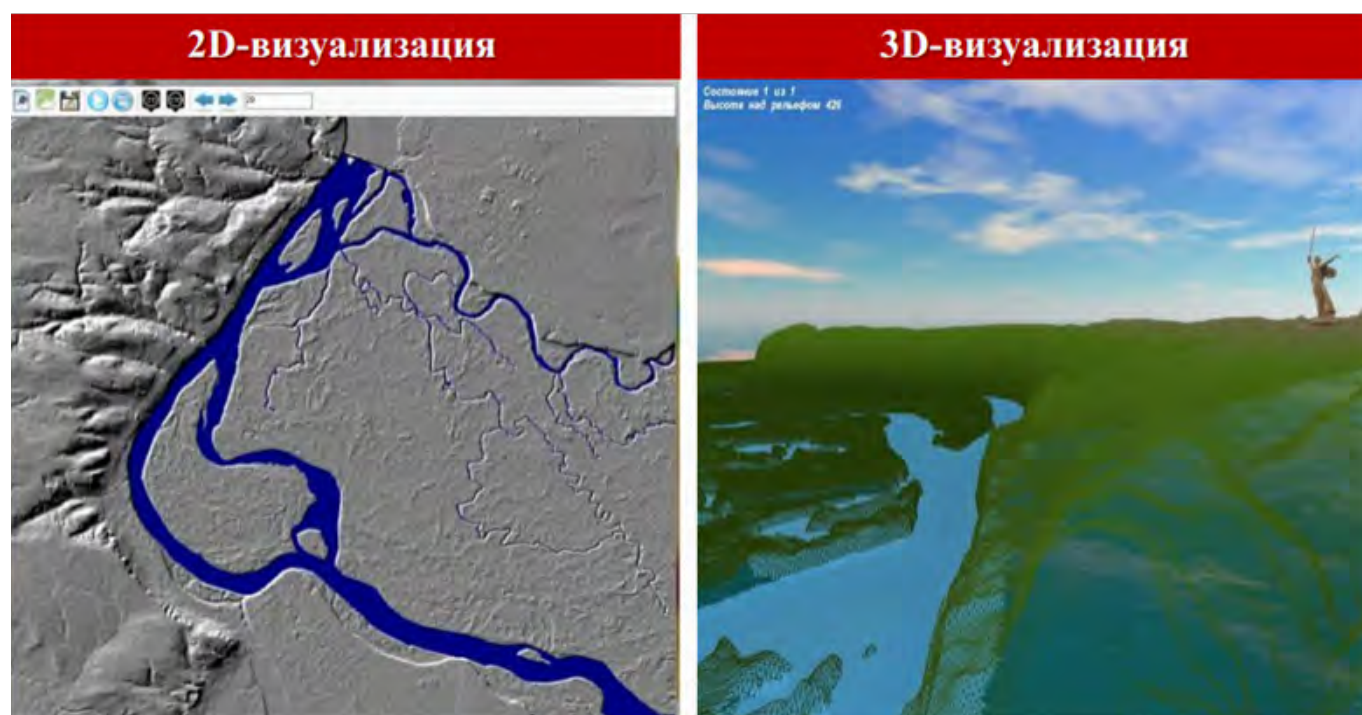
Рассматриваются проблемы использования гибридных вычислительных систем сверхвысокой производительности для решения задач математической физики. Описывается модульный комплекс программ для моделирования процессов многофазной фильтрации слабосжимаемых жидкостей (учитываются капиллярные и гравитационные силы), позволяющий задействовать весь потенциал многоядерных суперкомпьютеров, содержащих графические ускорители вычислений. На примере тестовых расчетов задач просачивания и нефтедобычи показано, что логическая простота предложенных вычислительных алгоритмов и надлежащая программная реализация обеспечивают высокое ускорение вычислений.

[Подробнее](#)

## ПРОГНОЗ ДИНАМИКИ ЗАТОПЛЕНИЯ ТЕРРИТОРИЙ В ПЕРИОД ЛИВНЕВОГО ПАВОДКА НА ОСНОВЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Татьяна Дьяконова

Представлены результаты численного моделирования динамики поверхностных вод в окрестности Крымска и Хабаровска в период ливневого паводка 2012/2013 гг. Гидродинамическое моделирование проводилось с использованием программно-аппаратного комплекса «ЭкоГИС». В основе компьютерной модели лежит новый эффективный численный алгоритм расчета (CSPH-TVD метод), позволяющий моделировать динамику поверхностных вод на произвольном рельефе местности с учетом различных физических факторов. Для эффективного использования вычислительных ресурсов применяется иерархическая система пространственных сеток разных масштабов. Использование суперкомпьютера на основе графических процессоров NVIDIA TESLA и CUDA-распараллеливание программных модулей позволили ускорить процесс расчета в сотни раз, что является важным фактором при построении прогностических моделей затопления территорий.



[Подробнее](#)

## УСКОРЕНИЕ РЕШАТЕЛЕЙ СЛАУ С ПОМОЩЬЮ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ

В.Л. Якушев, А.В. Филимонов, П.Ю. Солдатов

Благодаря параллельным алгоритмам и развитию архитектур центральных процессоров можно существенно оптимизировать работу решателей. Тем не менее, повышать производительность вычислений на традиционных архитектурах становится все сложнее. Альтернативой являются вычисления на графических процессорах GPU. Благодаря большому количеству ядер и другим особенностям архитектуры использование GPU позволяет значительно увеличить производительность вычислений для некоторых задач. В данный момент развитие технологий вычислений общего назначения на GPU идет быстрыми темпами, причем как на аппаратном, так и на программном уровне.

В данной работе рассмотрен прямой решатель симметричных разреженных СЛАУ реализует разложение Холецкого. Данный метод является прямым, а значит время работы решателя практически не зависит от количества правых частей. Данная особенность актуальна для применения метода в программных комплексах для расчета сооружений, так как в строительной механике часто возникают задачи с большим количеством частей. Решатель эффективно распараллелен для машин с общей памятью с помощью директив OpenMP.

Анализ работы алгоритма показал, что операция умножения матриц занимает 80-85% от времени факторизации. Используя GPU для умножения матриц, возможно серьезно уменьшить время выполнения умножений и, следовательно, серьезно уменьшить время работы решателя.

Решатель использует интерфейс BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms), который является де-факто стандартом интерфейса программирования приложений для создания библиотек, выполняющих основные операции линейной алгебры, в том числе умножения матриц (GEMM). В то же время существует библиотека cuBLAS, которая реализует тот же интерфейс, адаптирована для GPU и входит в стандартный комплект разработки CUDA Toolkit, поставляемый компанией NVIDIA. Таким образом, можно динамически подключить две библиотеки, оптимизированные для разных архитектур. Для внедрения cuBLAS в работу решателя потребовалось разработать набор функций, которые устраняют отличия в обращении к BLAS и cuBLAS (например, в передаваемых типах данных) и корректно осуществляет передачу данных между вычислительными мощностями.

[Подробнее](#)

## РАЗРАБОТКА СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЙ ТЕХНОЛОГИИ В ИНТЕРЕСАХ ИНСПЕКЦИИ ЯДЕРНЫХ ПОЛИГОНОВ И РЕАЛИЗАЦИИ ПЕРЕСТАНОВОЧНОГО ТЕСТА В ГЕНЕТИКЕ

А. А. Якименко

Настоящая работа посвящена рассмотрению возможностей использования суперкомпьютерной технологии моделирования применительно к решению двух современных актуальных задач - обнаружения подземных полостей (каверн), образующихся в результате проведения скрытых подземных ядерных взрывов и генетической детерминации признаков.

Решение первой задачи связано с проблемой «инспекции на месте» («ИнМ»), предусматривающей создание эффективных методов для уточненной локализации эпицентров скрытых подземных взрывов в районах испытательных полигонов. Решение рассматриваемой проблемы обусловлено необходимостью совершенствования средств контроля в поддержку Договора о всеобщем запрещении ядерных испытаний (ДВЗЯИ) от 1967 г. Другая задача, решаемая в диссертационной работе средствами параллельного моделирования, относится к важной для биологии задаче определения совокупностей генов либо их участков, вносящих значимый вклад в структуру ДНК. В работе получены следующие новые результаты:

1. Разработана и реализована на базе гибридного вычислительного комплекса НКС-30T+GPU суперкомпьютерная информационно-вычислительная технология для моделирования сейсмических волновых полей в сложнопостроенных средах с включениями неоднородности типа кавернозной зоны.
2. Получены результаты численных и натурных экспериментов методом вибрационного просвечивания Земли, которые будут способствовать совершенствованию производственной технологии «инспекции на месте» в районах проведения скрытых ядерных и иных взрывов.
3. Разработаны параллельные алгоритмы и программы реализации перестановочного теста на гибридном суперкомпьютере НКС-30T+GPU, которые будут способствовать ускорению решения задачи генетической детерминации признаков, направленной на создание моделей наследования и проверке генетических гипотез на эмпирическом материале.
4. Разработанные автором программные комплексы для геофизического моделирования и реализации перестановочного теста в генетике нашли свое практическое применение соответственно в Институте вычислительной математики и математической геофизики и Институте цитологии СО РАН.

[Подробнее](#)

## КОНТАКТЫ И ПОЛЕЗНЫЕ ССЫЛКИ

Если вы хотите, чтобы ваша статья появилась в следующем выпуске CUDA Альманах пишите нам на: [landreeva@nvidia.com](mailto:landreeva@nvidia.com)

По вопросам обучения CUDA обращайтесь в наш тренинговый центр: [www.parallel-compute.ru](http://www.parallel-compute.ru)

По вопросам приобретения NVIDIA GPU и по прочим техническим вопросам пишите нам на: [adzhoraev@nvidia.com](mailto:adzhoraev@nvidia.com)

Протестируйте PGI OpenACC compiler бесплатно в течение месяца: [www.nvidia.ru/openacc](http://www.nvidia.ru/openacc)

Узнайте подробнее про CUDA: [www.nvidia.ru/cuda](http://www.nvidia.ru/cuda)

Полный каталог приложений, ускоряемых на CUDA: <http://www.nvidia.ru/gpuapps>