

# 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



# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Профессиональный  
уровень

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



URSS

МОСКВА

**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
<b>1 Архитектура вычислительных систем</b>	<b>13</b>
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
<b>2 Программирование многопоточных приложений</b>	<b>24</b>
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
<b>3 Технология OpenMP</b>	<b>47</b>
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
<b>4 Программирование в рамках стандарта MPI</b>	<b>101</b>
4.1 Основы программирования в рамках стандарта MPI	102

4.2	Операции передачи сообщений	108
4.3	Функции коллективного взаимодействия	113
4.4	Решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона	130
<b>5</b>	<b>Пакет визуализации научных данных ParaView</b>	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
<b>6</b>	<b>Инструментарий для разработки параллельных программ</b>	164
6.1	Установка	164
6.2	Работа с проектом	165
6.3	Отладка параллельной программы	182
6.4	Анализ производительности	185
<b>7</b>	<b>Прикладное программное обеспечение</b>	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
<b>8</b>	<b>Построение геометрии и генерация сеток</b>	206
8.1	Общие сведения	206
8.2	Gmsh	209
8.3	NETGEN	228
<b>9</b>	<b>Вычислительная библиотека PETSc</b>	232
9.1	Общая информация	232
9.2	Решение линейной задачи	244
9.3	Решение нелинейных задач	252
9.4	Решение нестационарной задачи	261
<b>10</b>	<b>Вычислительный пакет FEniCS</b>	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
<b>11</b>	<b>Численное исследование прикладных проблем</b>	<b>302</b>
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