

УДК 004.67; 004.72; 004.75 В. Н. ТКАЧЕВ¹, В. В. ЗАХАРЕНКО¹, Я. Ю. ВАСИЛЬЕВА¹,
Ю. А. ЦАРИН¹, Е. Ю. БАННИКОВА¹, В. В. ИЛЮШИН¹,
В. Е. САВАНЕВИЧ², О. В. ГЕРАСИМЕНКО², А. Б. АННЕНКОВ³,
С. Ф. КУЛИШЕНКО¹, Д. Ф. КУЛИШЕНКО¹

¹ Радиоастрономический институт НАН Украины,
ул. Краснознаменная, 4, г. Харьков, 61002, Украина
E-mail: tkachov@rian.kharkov.ua, zakhar@rian.kharkov.ua

² Харьковский национальный университет радиоэлектроники,
пр. Ленина, 14, г. Харьков, 61166, Украина

³ Запорожский институт экономики и информационных технологий,
ул. Кияшко, 16-Б, г. Запорожье, 69041, Украина

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРИД-ТЕХНОЛОГИЙ В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ РАДИОФИЗИКИ И РАДИОАСТРОНОМИИ

Для решения сложных и ресурсоемких научных и прикладных задач все шире используются так называемые распределенные вычисления. Одним из направлений их развития являются грид-технологии. Они позволяют эффективно и надежно управлять компьютерными ресурсами, включенными в общую сеть. Украинский академический грид объединяет вычислительные мощности и ресурсы хранения данных более 30 научно-исследовательских институтов НАН Украины. Это обеспечивает функциональную среду, позволяющую решать широкий круг научных задач.

В работе представлены результаты использования грид-инфраструктуры, созданной в Радиоастрономическом институте Национальной академии наук Украины, для численного решения задач в различных областях радиоастрономии, астрофизики и радиофизики. Предложены также перспективные направления более широкого использования параллельных вычислений в научных исследованиях.

Ключевые слова: распределенная обработка данных, грид-технологии, веб-каталог, специализированная виртуальная обсерватория, CUDA

1. Введение

Радиоастрономический институт Национальной академии наук Украины (РИ НАНУ) является ведущим научно-исследовательским институтом в Украине в области радиоастрономии, радиофизики и исследований ближнего космоса. Фундаментальными научными направлениями деятельности института являются разработка теории и физических принципов создания радиотелескопов и совершенствование инструментальной базы для радиоастрономических наблюдений, проведение радиоастрономических исследований в широком диапазоне радиоволн, исследования Земли и планет, околоземного и межпланетного пространства средствами радиоастрономии и дистанционного зондирования. Институт проводит также исследования в области теоретической радиофизики, микроволновой спектроскопии и прикладные исследования радиотехнических систем в диапазоне сверхвысоких частот.

© В. Н. Ткачев В. В. Захаренко, Я. Ю. Васильева,
Ю. А. Царин, Е. Ю. Банникова, В. В. Илюшин,
В. Е. Саваневич, О. В. Герасименко, А. Б. Анненков,
С. Ф. Кулишенко, Д. Ф. Кулишенко, 2013

Благодаря государственной целевой научно-технической программе “Внедрение и применение грид-технологий” в течение 2010–2012 гг. в РИ НАНУ был создан грид-узел [1, 2]. Его вычислительные мощности и объем дискового пространства для хранения данных позволяют решать целый спектр научных задач, в том числе:

- обработка и хранение данных декаметрового обзора Северного неба с целью поиска пульсаров и транзиентных источников излучения;
- создание баз данных и виртуальной обсерватории на основе полученных результатов обработки наблюдений;
- расчет параметров антенн для различных диапазонов длин волн, от декаметрового до миллиметрового;
- численные расчеты движений в задаче многих тел (N-body simulation) при моделировании затеняющих торов в активных ядрах галактик;
- моделирование спектральных свойств молекул с внутренними молекулярными колебаниями большой амплитуды;
- решение задач дифракции для объемных периодических структур, фотонных кристаллов, задач разработки метаматериалов;

– хранение больших объемов информации для задач обработки изображений, поиска астрономических источников и т. д.

И количество задач ежегодно увеличивается благодаря модернизации грид-узла и гибкому управлению ресурсами.

Во втором разделе приведено описание грид-узла и его составляющих, в третьем – примеры использования рабочих станций узла для решения различных астрофизических и радиофизических задач. В четвертом разделе сформулированы выводы и направления дальнейшего развития грид-структуры РИ НАНУ.

2. Технические параметры грид-узла

Структура грид-узла и схема взаимодействия серверов представлена на рис. 1. Узел включает в себя средства для связи локальной вычислительной сети (ЛВС) РИ НАНУ с внешними линиями связи и провайдерами (ГП НТЦ “Украинская академическая и исследовательская сеть” ИФКС НАН Украины – “УАРНЕТ”, и ТОВ “РЕТН”). Основная его часть – вычислительный кластер – имеет четыре вычислительных станции (ВС) общей произ-

водительностью 680 ГФлопс при работе с 64-рядными числами. Они основаны на двойных двух-процессорных платформах Superserver 6015T-INFV с двумя процессорами Intel Xeon E5440 каждая. На периферийных ВС кластера установлена операционная система Linux 2.6.25-gentoo-r7. Кластер отвечает требованиям грид-узла уровня Tier-3 по принятой в ЦЕРНе терминологии.

Управляющая ВС кластера имеет следующие технические характеристики: 2 процессора Intel® Xeon® CPU E5455 с 16 Гб оперативной памяти (ОЗУ) для каждого процессора, 30 Тб дискового пространства, организованного в виде массива жестких магнитных дисков, HDD. На управляющей ВС кластера установлена операционная система Scientific Linux, ядро 2.6.18-53.1.4.el5. Характеристики периферийных ВС кластера: Superserver 6015T-INFV 4x Intel® Xeon® CPU E5440, 32 Гб ОЗУ, операционная система Linux 2.6.25-gentoo-r7. ВС функционируют в составе локальной вычислительной сети РИ НАНУ.

Развитие возможностей параллельных вычислений сервера связано с технологией CUDA (Compute Unified Device Architecture – программно-

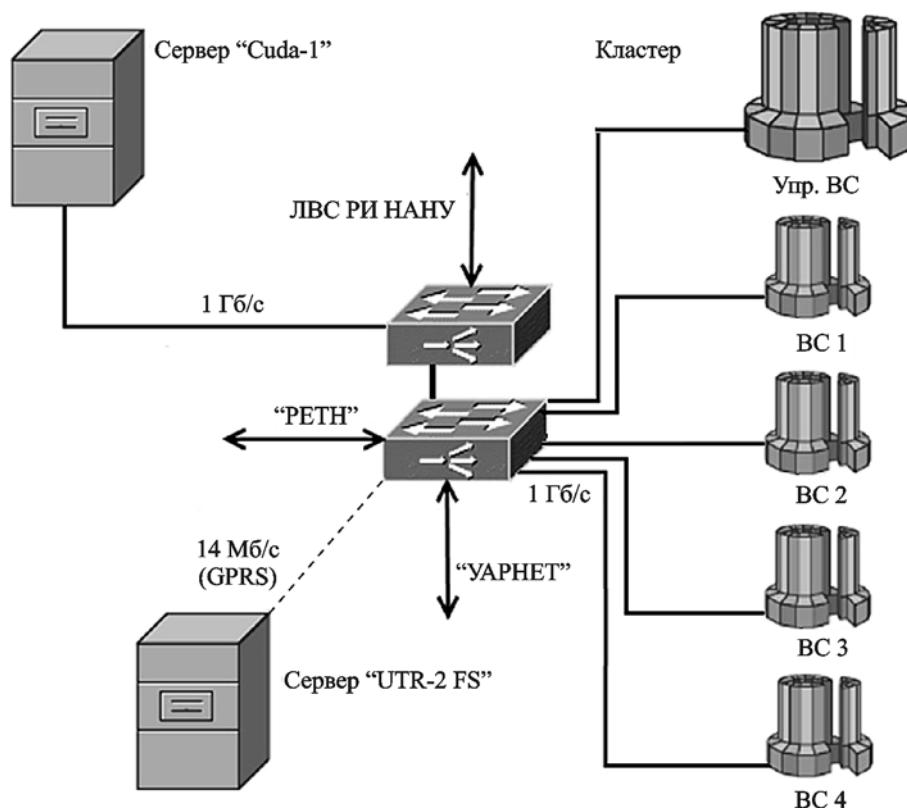


Рис. 1. Структура грид-узла и схема взаимодействия серверов

аппаратная архитектура параллельных вычислений). Сервер “Cuda-1” явился первым сервером в составе грид-узла, содержащим видеоплату (GTX 670, разработчик – компания NVIDIA) с использованием возможностей параллельных вычислений. Такие устройства имеют массив (от нескольких сотен до нескольких тысяч) параллельно работающих графических процессоров GPU (Graphics Processing Unit). Характеристики ВС: процессор Intel® Core(TM) i5-2500 CPU 3.30 ГГц, 16 ГБ ОЗУ, графическая карта GTX 670, 24 Тб HDD. ВС функционирует в составе локальной вычислительной сети РИ НАНУ.

Сервер “UTR-2 FS” имеет похожие характеристики (процессор Intel Core i7-3770 3.4 ГГц, 8 МБ, 32 ГБ ОЗУ, графическая карта GTX 680, 5 × 2 Тб HDD), но функционирует в составе локальной вычислительной сети радиотелескопа УТР-2. ВС выполняет задачи обработки и хранения данных непосредственно в Радиоастрономической обсерватории имени С. Я. Брауде РИ НАНУ (вблизи пос. Граково Харьковской обл.).

Описанные технические возможности, гибкость управления и не в последнюю очередь обеспечение бесперебойного питания сервера позволили решить ряд задач, которые требовали очень большого (десятки терабит) дискового пространства для хранения промежуточных результатов вычислений, а также длительного времени работы и значительных вычислительных ресурсов (сотни часов непрерывной работы на GPU).

3. Задачи, решаемые с помощью грид-инфраструктуры РИ НАНУ

Во введении был очерчен круг задач, которые могут эффективно решаться с помощью грид-инфраструктуры, созданной в РИ НАНУ. Ниже более подробно проиллюстрированы результаты научных исследований в нескольких направлениях.

3.1. Обработка и хранение данных декаметрового обзора Северного неба с целью поиска пульсаров и транзиентных источников

Концепция декаметрового обзора Северного неба с целью поиска пульсаров и транзиентных источников состоит в использовании суточного вращения Земли и особенностей диаграммы направлен-

ности радиотелескопа УТР-2. Отличие проводимого с 2010 г. сканирующего обзора на УТР-2 от похожего ранее проведенного обзора источников состоит в использовании суммарного, а не перемноженного луча диаграммы направленности. При этом источники (пульсары) находятся в крестообразной диаграмме суммы антенн (“Север–Юг” и “Запад–Восток”) около часа, тогда как перемноженную (карандашную) диаграмму те же источники пересекут в течение 2 мин. Таким образом, при той же длительности наблюдений время накопления для периодического источника возрастает примерно в 30 раз, что существенно увеличивает чувствительность обзора.

Центры пяти лучей радиотелескопа находятся в плоскости локального меридиана (код $U = 0$) и смещены системой формирования лучей на $\sim 30'$ с юга на север. Использование данных, полученных в течение суточного оборота с получасовым перекрытием для поиска всех источников с выбранным склонением, обеспечивает время слежения за источником около часа. Очевидно, что накапливать можно только повторяющиеся сигналы. Для транзиентных источников чувствительность будет равна мгновенной, но поле зрения радиотелескопа будет определяться видом суммарной диаграммы направленности (“крест”–диаграмма $30' \times 15^\circ$ с востока на запад и $1^\circ \times 15^\circ$ с севера на юг), которая больше перемноженной ($30' \times 30'$) примерно в 100 раз.

При ширине каждого из 5 лучей около $30'$ за 24 ч совершается обзор полоски неба шириной $\sim 2.5^\circ$ по склонению. Диапазон склонений $-10^\circ \div 90^\circ$ покрывается за ~ 40 суток. Предельное склонение -10° выбрано из условия падения эффективной площади антенной системы телескопа в 2 раза. Координаты источника по прямому восхождению (при условии достаточного соотношения сигнал/шум) могут быть восстановлены с использованием разностной или перемноженной диаграммы направленности.

Временное разрешение обзора (8 мс) выбрано с учетом рассеяния сигнала в декаметровом диапазоне. Только несколько известных пульсаров имеют время рассеяния сигнала менее 8 мс. Для всех других даже сигнал с “нулевой” длительностью из-за многолучевого распространения в межзвездной среде будет “размазан” во времени. Следуя этой логике, периоды искомым пульсаров нужно выбирать большими нескольких отсчетов

выбранного временного разрешения. Таким образом, периоды пульсаров ограничиваются снизу значениями $50 \div 100$ мс.

Первоначально планируется для поиска повторяющегося излучения проводить исследования для значений меры дисперсии (DM) в интервале $0 \div 30$ пк/см³, а для поиска транзитного излучения – в интервале $0 \div 60$ пк/см³ с шагом 0.01 пк/см³. В дальнейшем диапазон обрабатываемых значений DM будет расширен.

Для записи и последующей обработки данных обзора необходимо 80 ТБ дискового пространства для постоянного хранения и около 20 ТБ для хранения промежуточных результатов конвейерной [3] обработки данных. В настоящее время используется около 20 Тб на дисках грид-сервера и ведутся разработка и тестирование процедур конвейерной обработки для запуска их в режиме параллельных вычислений.

Перед началом обзора был выполнен предварительный крайне важный этап – обзор пульсаров, известных по данным высокочастотных измерений. (Более 90 % вычислений выполнено на грид-сервере РИ НАНУ в 2011 г.). Впервые, благодаря большому объему оперативной памяти рабочей станции грид-узла, при обработке данных было достигнуто шестидесятикратное уменьшение затрачиваемого времени по отношению ко времени, затрачиваемом на аналогичную работу на персональном компьютере. Бесперебойность работы сервера и автоматизация обработки, реализованная в виде программного “конвейера”, позволили произвести анализ данных в очень сжатые сроки.

В настоящее время известно около 2000 радиопульсаров. Максимум спектра излучения приходится на метровые волны. Но в диапазонах < 30 МГц и > 6 ГГц наблюдались только несколько источников. В сантиметровом диапазоне это связано с падением потока излучения пульсара с ростом частоты по степенному закону (f^α) с показателем степени $\alpha = -1.8 \div -1.6$, а в декаметровом – к практически такому же падению потока добавляется рост фона Галактики ($\sim f^{-2.5}$) и увеличение уровня помех в десятки тысяч раз. Поэтому до начала наших наблюдений оставалось непонятным, возможно ли обнаружить в декаметровом диапазоне еще какое-то число пульсаров дополнительно к уже известным десяти.

Совершенствование приемной аппаратуры, методов очистки данных от помех, уточнение DM

позволили увеличить это число до 40, причем не из всех известных по наблюдениям в оптическом диапазоне ~ 2000 пульсаров, которые недоступны для наблюдений как импульсные источники в радиодиапазоне вследствие рассеяния, а из полной выборки 74-х близких источников с $DM < 30$ пк/см³. Таким образом, “детектируемость” (отношение количества детектированных к известным) пульсаров в декаметровом диапазоне превысила 55 % [4].

Если учесть, что в этих же исследованиях было подтверждено, что профиль среднего импульса расширяется на низких частотах (25 МГц) примерно на $60 \div 80$ % по отношению к профилю на частоте 100 МГц, то можно ожидать открытия десятков неизвестных ранее источников.

Распределение времени наблюдений позволило провести запись уже более половины площади Северного неба в режиме обзора.

Обработка включает в себя очистку данных от помех (алгоритм очистки постоянно совершенствуется) и нормировку с использованием калибровочных измерений. Очищенный и нормированный динамический спектр, содержащий импульсы пульсара, приведен на рис. 2, а. После расчета времени дисперсионного запаздывания в межзвездной среде для каждого из 4096 каналов приемника производится компенсация дисперсии. Дедиспергированные импульсы выглядят так, как показано на рис. 2, б. Поиск периодичностей в принимаемом сигнале проводится с помощью преобразования Фурье, результат которого показан на рис. 2, в. Для мощных пульсаров возможно обнаружение нескольких десятков гармоник, но для большинства обнаруживаются только первые несколько гармоник. Для поиска неизвестных пульсаров процедура повторяется для DM от 0 до 30 пк/см³ с шагом 0.01 пк/см³. Если пульсар имеет мощные индивидуальные импульсы, это может быть использовано как критерий его поиска. Пример поиска пульсара по индивидуальным импульсам приведен на рис. 3. На рис. 3, а показан временной ряд, соответствующий правильной компенсации дисперсии (с истинным значением постоянной дисперсии). Видны периодические всплески, соответствующие индивидуальным импульсам пульсара. На рис. 3, б показана характерная зависимость формы индивидуальных импульсов от постоянной дисперсии, которая используется в процедуре дедиспергирования. По мере удаления от истинного значения постоянной дисперсии, импульс расширяется и ослабевает.

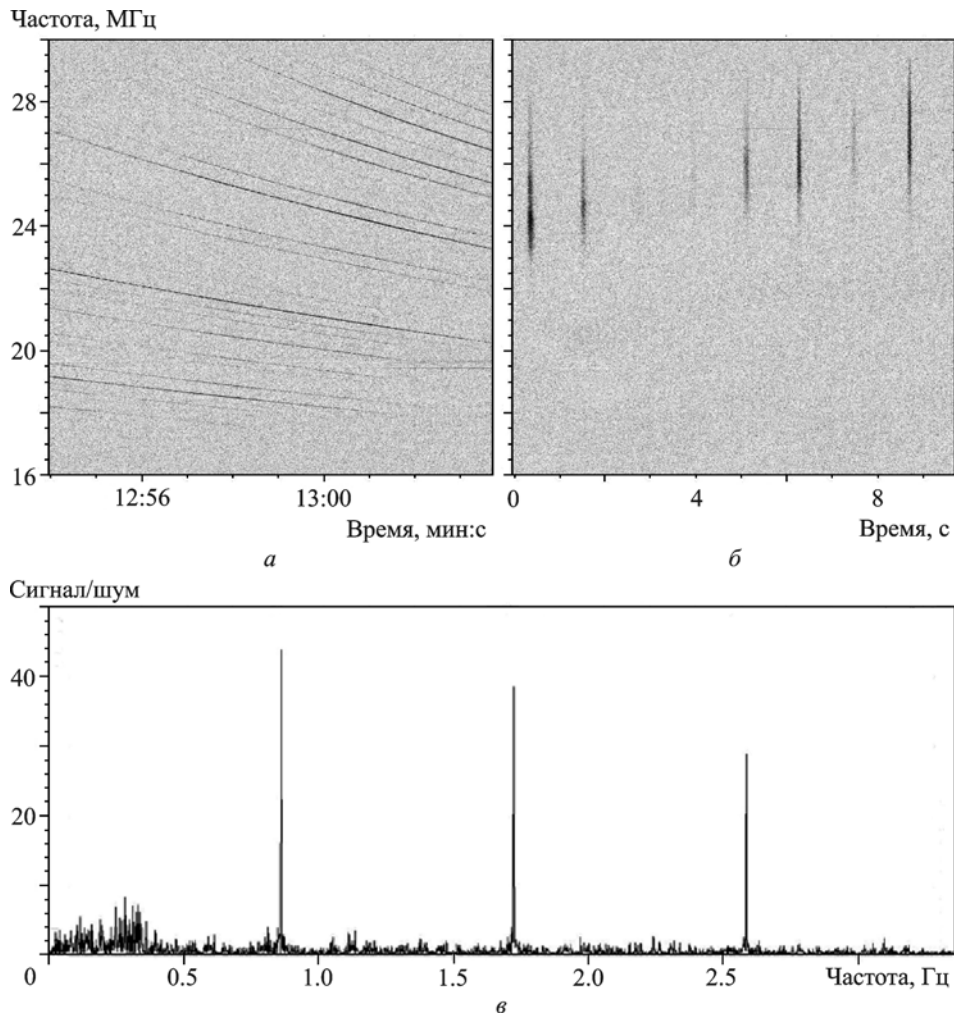


Рис. 2. Запись импульсов пульсара B0809+74 на радиотелескопе УТР-2 после очистки от помех и сглаживания фона (а); импульсы пульсара B0809+74 после компенсации дисперсионной задержки (б); результат преобразования Фурье от интегрированного во всей полосе частот временного ряда, содержащего сигнал пульсара B0943+10, имеющего период ~ 1.098 с (в)

Транзистентные источники также будут выглядеть как одиночные импульсы пульсаров. Это диспергированные в межзвездной среде короткие мощные импульсы, порождаемые процессами вблизи поверхности нейтронных звезд, черных дыр, аккрецией вещества на эти объекты, их слиянием и т. п.

Все результаты получены с помощью программного обеспечения, разработанного для поиска радиоизлучения пульсаров. Для известных пульсаров уточнение DM не требует больших затрат времени, тогда как для поиска неизвестных импульсных сигналов необходимо перебирать “пробные” значения DM с малым шагом, а для поиска периодичностей в принимаемом сигнале необходима спектральная или корреляционная обработка. По этим причинам затраты времени на этапы обработки возрастают в тысячи раз. Если только

для обзора известных пульсаров потребовалось примерно полгода машинного времени для обработки данных для 74-х источников, то становится очевидной необходимость в распараллеливании вычислений при обработке полного обзора Северного неба.

Очистка и нормировка данных не требует распараллеливания. Время очистки меньше или равно времени наблюдений, поэтому она легко встраивается в конвейерную обработку на вычислительных мощностях радиотелескопа УТР-2. Второй этап – дедиспергирование со всеми “пробными” значениями DM (3000 шагов) – требует обработки больших массивов данных ($100 \div 200$ Гб), поэтому распараллеливание вычислений в грид-среде наиболее эффективно между теми серверами, с которыми сервер РИ НАНУ имеет наи-

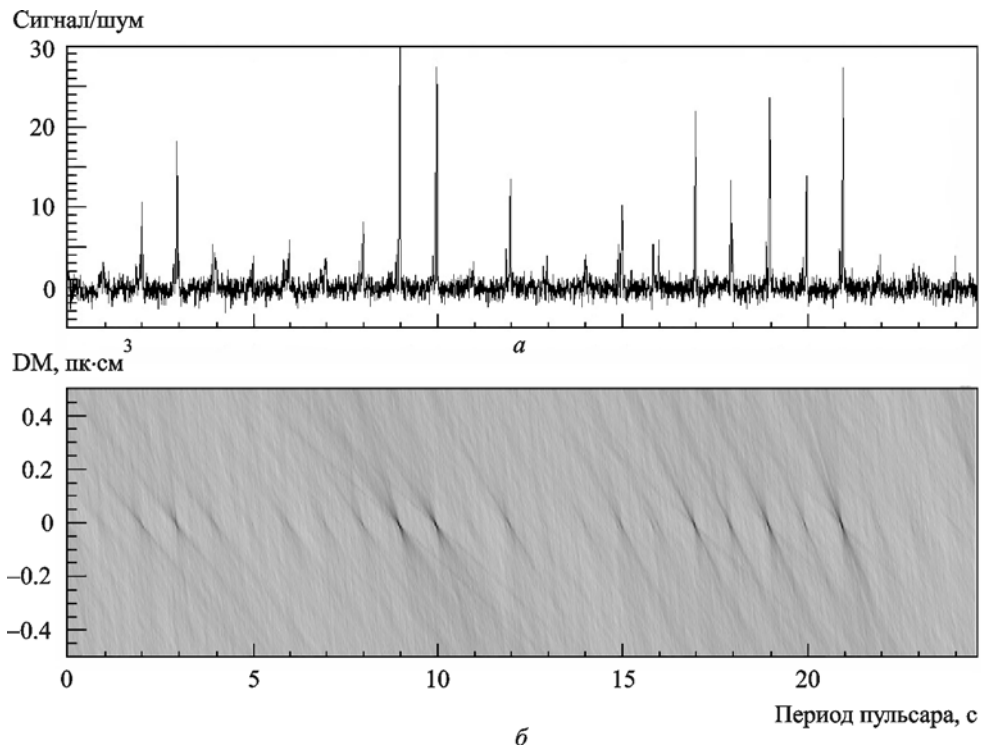


Рис. 3. Временной ряд, полученный после компенсации дисперсии и интегрирования во всей полосе частот для пульсара B0809+74 (а); поведение данного временного ряда при отклонении от правильной меры дисперсии (б)

более быстрые линии связи. Это сервер Института радиофизики и электроники им. А. Я. Усикова НАН Украины (ИРЭ НАНУ) и серверы других академических институтов г. Харькова. Первые тесты проводились на грид-серверах РИ НАНУ и ИРЭ НАНУ. На грид-сервере РИ НАНУ время обработки по программе поиска составило в 2012 г. 4 месяца (сентябрь–декабрь) после установки и настройки в августе 2012 г. сервера с локальным хранилищем 20 ТБ.

Следующая задача – поиск периодичностей, как и чистка, не требует больших временных затрат. Она может быть распараллелена, чтобы быстрее подготовить массив данных для более глубокого анализа в интерактивном режиме. Окончательный многопараметрический поиск проводится с учетом зависимостей различных свойств радиоизлучения пульсаров и характеристик среды распространения.

Отдельно существует задача мониторинга транзитных событий. Для ее решения требуется анализ поступающих данных наблюдений в режиме реального времени на предмет совпадения какого-либо широкополосного сигнала с одной из “пробных” мер дисперсии. Для этой задачи пред-

варительная подготовка и обработка данных должны производиться гораздо быстрее, чем в грид-среде. Обеспечить такую скорость непосредственно в пункте наблюдений может только технология с использованием GPU. Именно поэтому при закупке оборудования особое место отводилось приобретению плат, обладающих такими возможностями.

Технология CUDA позволяет существенно увеличить вычислительную производительность. Построение зависимости DM от времени в режиме реального времени для коротких последовательностей входных данных, которая используется для поиска транзитных источников, в настоящее время находится в процессе отладки.

3.2. Численные расчеты в задаче многих тел при моделировании затеняющих торов в активных ядрах галактик

Если сравнивать структуру задач, для которых использование GPU дает максимальный выигрыш, то наибольшую эффективность имеют алгоритмы с многократной обработкой ограниченного массива данных [5]. В перечне задач, выполняемых на грид-сервере РИ НАНУ, наибольший выигрыш

при применении вычислительных возможностей GPU достигается для таких программ, как расчет движений системы многих тел.

Одним из структурных элементов активных ядер галактик является газопылевой тор, который состоит из облаков, движущихся в гравитационном поле центральной массы. Наблюдательные данные указывают на то, что затеняющие торы геометрически толстые (отношение малого радиуса к большому достигает значений, близких к единице). Объяснение механизма, который поддерживает геометрическую толщину тора, является одним из принципиальных вопросов астрофизики активных ядер галактик. До настоящего времени проводились моделирования тора в предположении непрерывно распределенной среды в нем. В работе [6] сделан переход от непрерывной среды к дискретной среде, т. е. учтено, что тор состоит из облаков, которые совершают орбитальное движение вокруг центральной массы. При этом принимались во внимание не только влияние центральной массы (сверхмассивной черной дыры), но и самогравитация тора. Данная задача сводится к численному интегрированию уравнений движения, которые с учетом центральной массы M_c имеют вид:

$$\mathbf{a}_i = -\frac{GM_c}{R^2} \frac{\mathbf{r}_i}{r_i^3} + \frac{\mathbf{F}_i}{m_i},$$

здесь \mathbf{a}_i – ускорение i -й частицы, приобретаемое за счет гравитационного взаимодействия всех частиц системы; G – гравитационная постоянная; R – большой радиус тора; \mathbf{r}_i – радиус-вектор i -й частицы; m_i – масса частицы. Суммарная гравитационная сила, действующая на i -ю частицу со стороны каждой j -й, имеет вид:

$$\mathbf{F}_i = -\frac{Gm_i}{R^2} \sum_{j=1}^N m_j \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{\left(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 + \varepsilon^2\right)^{3/2}},$$

где N – полное число частиц в торе, ε – параметр, который позволяет исключить бесконечное возрастание силы взаимодействия двух частиц при их тесном сближении. Этот параметр означает также, что мы моделируем не точечные частицы, а мегачастицы, представляющие собой сферические области (облака), в которых распределение плотности подчиняется закону Пламмера [7]. В качестве начальных условий использовались ус-

ловия для тора Кеплера [6] данного геометрического параметра $r_0 = R_0/R$, где R_0 – малый радиус тора. Моделирование показывает, что начальное изменение формы сечения тора не влияет на конечное распределение частиц в торе и равновесную форму его сечения, достигаемую в процессе релаксации.

Из численного моделирования следует, что на начальном этапе (до 20 орбитальных периодов) происходят значительные изменения кинетической и потенциальной энергии. Изменение потенциальной энергии связано с изменением формы сечения тора и плотности частиц. Именно на этом достаточно коротком временном интервале распределение частиц в торе меняется существенно, и он приобретает равновесное сечение, которое имеет форму овала. Некоторые результаты исследований приведены на рис. 4. Показана эволюция сечения торов с параметром $r_0 = 0.5$, числом частиц $N = 8192$ и массой тора 0.045, 0.056 и 0.07 от центральной массы (рис. 4, *a–в*). При этом более острый конец ориентирован к центральной массе, а уплощенная часть – к внешней области, что как раз противоположно начальному состоянию (кеплеровский тор). Поэтому очевидно, что существенные флуктуации энергии связаны с тем, что тор стремится к форме с сечением, инвертированным по отношению к начальному состоянию. При $t > 20$ (t – количество орбитальных периодов) флуктуации кинетической и потенциальной энергии становятся незначительными. Это означает, что в дальнейшем форма сечения тора существенно не меняется. При этом выполняется условие теоремы вириала: сумма кинетической энергии частиц и полной энергии системы равна нулю ($E_{kin} + E_{full} = 0$), – что характеризует стационарное или линейно нестационарное состояние системы. В равновесном состоянии сечение тора имеет форму овала с гауссовым распределением плотности (рис. 4). Геометрическая толщина тора поддерживается за счет движения облаков по наклоненным орбитам.

Из рис. 4, *a–в* видно, что незначительное изменение массы тора существенно не влияет на равновесную форму сечения. Следует отметить, что на длительных временных интервалах эволюции тора (до 1000 орбитальных периодов) обнаруживается постепенное увеличение характерных размеров его сечения. Такое медленное “расползание” сечения связано с иррегулярными силами,

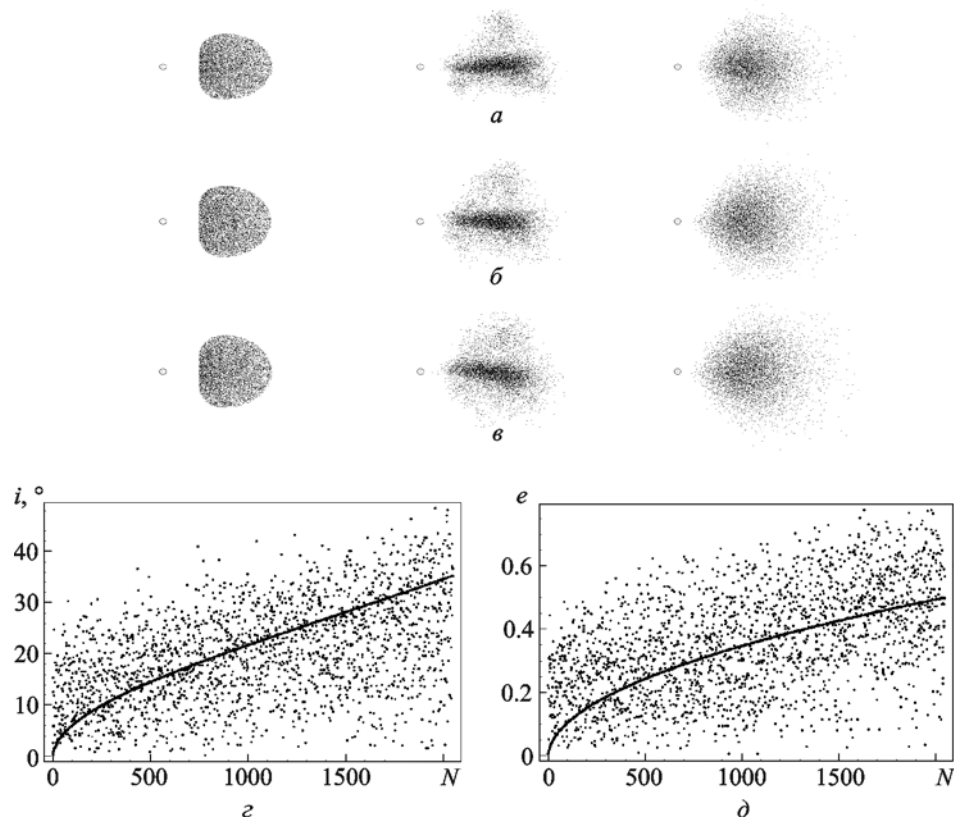


Рис. 4. Эволюция сечения тора с параметром $r_0 = 0.5$, с числом частиц $N = 8192$ и массой тора 0.045 (а), массой тора 0.056 (б) и массой тора 0.07 (в) от центральной массы; распределение наклонений орбит частиц (z) и распределение эксцентриситетов орбит частиц (d) (линия – начальное распределение, точки – после 1000 орбитальных периодов)

возникающими вследствие гравитационного взаимодействия между частицами. Анализ изменения фиктивного углового момента [6] и распределения частиц по элементам орбит позволяет сделать вывод, что в равновесном состоянии орбиты частиц в сечении тора хаотизируются. Пример распределения наклонений и эксцентриситетов показан на рис. 4, z, d.

При взаимодействии частиц одни из них теряют энергию и переходят на более низкие орбиты, а энергия других увеличивается, и они переходят на более вытянутые орбиты с большим значением эксцентриситета. В результате таких взаимодействий внешняя граница сечения тора постепенно увеличивается.

Доказательство устойчивости такой сложной двухсвязной фигуры, как гравитирующий тор [6], закладывает основы нового подхода к изучению затеняющих торов. Следующим этапом исследований является моделирование подобных систем с различными стартовыми параметрами. Их может быть достаточно много: соотношение цент-

ральной массы и массы тора, малый радиус тора, объемная плотность, число частиц в торе и т. п. Уже полученное с помощью видеокарты GTX 260 увеличение скорости расчетов в 90 раз по сравнению со скоростью вычислений на одном ядре процессора на грид-сервере дало все основания наращивать вычислительные мощности графических процессоров в инфраструктуре кластера. В настоящее время для работы доступны такие видеокарты: GTX 590 (отдел астрофизики), GTX 670 (2 шт., грид-сервер РИ НАНУ), GTX 680 (сервер радиотелескопа УТР-2). Моделирование эволюции гравитирующих систем на длительных временных интервалах (тысячи орбитальных периодов) требует больших вычислительных затрат. Суммарно для этой задачи все видеокарты работали более 12 месяцев.

Эти вычисления являются основой для получения интегральных характеристик, таких как изменение кинетической и потенциальной энергии системы, эффективный размер тора, элементы орбит частиц. Исходя из обобщенных харак-

теристик, можно говорить об устойчивости системы, предположительном пути ее эволюции и возможных характерных проявлениях при ее наблюдении. В дальнейшем результаты численных экспериментов будут сравниваться с наблюдательными данными.

3.3. Спектроскопия астрофизических молекул с несколькими внутримолекулярными колебаниями большой амплитуды: 2 эквивалентные метильные группы в молекуле с C_{2v} равновесной конфигурацией

Радиоастрономия микроволнового диапазона всегда была основным инструментом межзвездной химии, и лабораторная спектроскопия является ее ключевой составной частью. Спектральная подпись вещества должна быть изучена в лабораторных условиях, прежде чем вещество может быть идентифицировано в межзвездной среде. При этом недостаточно просто получить запись спектра в лабораторных условиях, необходимо провести ее анализ и описание в рамках соответствующей модели, которая даст возможность смоделировать спектр для условий межзвездной среды. К одному из интересных, с точки зрения радиоастрономии, классов молекул относятся молекулы с внутримолекулярными колебаниями большой амплитуды. Именно этот тип молекул отвечает за большинство наблюдаемых при радиоастрономических наблюдениях межзвездных облаков спектральных линий. При этом существуют определенные сложности при теоретическом моделировании наблюдаемых спектров таких молекул.

Рассматриваются молекулы имеющие C_{2v} равновесную конфигурацию и включающие в свой состав две эквивалентные C_{3v} группы. Примером таких молекул могут служить такие обнаруженные в межзвездном пространстве молекулы, как ацетон $(CH_3)_2CO$ и диметилэфир $(CH_3)_2O$. Ниже рассмотрен пример спектра молекулы ацетона $(CH_3)_2CO$. В этой молекуле потенциальный барьер внутреннему вращению двух эквивалентных метильных групп достаточно низкий, что приводит к торсионным колебаниям метильных групп большой амплитуды и соответствующим расщеплениям в спектре. Схематически структура молекулы представлена на рис. 5, а. Базовый гамильтониан для такой молекулы может быть представлен следующим образом:

$$H = F(p_1^2 + p_2^2) + F'(p_1 p_2 + p_2 p_1) + \frac{1}{2}V_3(2 - \cos 3\alpha_1 - \cos 3\alpha_2) + \frac{1}{2}V_{33}(\cos 3\alpha_1 \cos 3\alpha_2 - 1) + \frac{1}{2}V'_{33} \sin 3\alpha_1 \sin 3\alpha_2 + AJ_z^2 + BJ_x^2 + CJ_y^2,$$

где α_1, α_2 – соответствующие торсионные координаты; p_1, p_2 – угловые моменты, сопряженные торсионным колебаниям двух метильных групп; J_x, J_y, J_z – проекции полного углового момента молекулы на молекулярно фиксированные оси координат; A, B, C – вращательные постоянные молекулы; F, F' – кинетические коэффициенты торсионного движения; V_3, V_{33}, V'_{33} – параметры двумерной потенциальной функции взаимодействия метильных групп с остовом молекулы и друг с другом.

Основной проблемой с точки зрения проведения расчетов с использованием данной модели гамильтониана, который явным образом использует двумерную потенциальную функцию взаимодействия метильных групп с остовом молекулы и друг с другом, является проблема разделения вращательной и колебательной частей задачи, а точнее, необходимость совместного описания вращения молекулы как целого и колебаний большой амплитуды. В обычных полужестких асимметричных молекулах вращательная и колебательная степени свободы хорошо разделяются, что дает возможность отдельно описывать вращательные спектры большинства колебательных состояний. С точки зрения численных расчетов это означает, что размерность матрицы гамильтониана в базе Ванга равна примерно $(2J + 1)/4$, где J квантовое число полного углового момента молекулы. Невозможность разделить вращательные степени свободы и молекулярные координаты, описывающие торсионное колебание метильных групп, приводит к необходимости построения матрицы гамильтониана для прогрессии колебательных состояний, ассоциируемых с данным колебанием большой амплитуды. Это приводит к существенному увеличению размерности матрицы гамильтониана, которая равна $(2J + 1)n_{vt}$, где n_{vt} – число колебательных состояний, включаемых в рассмотрение. При этом следует отметить, что время диагонализации матриц с целью нахождения

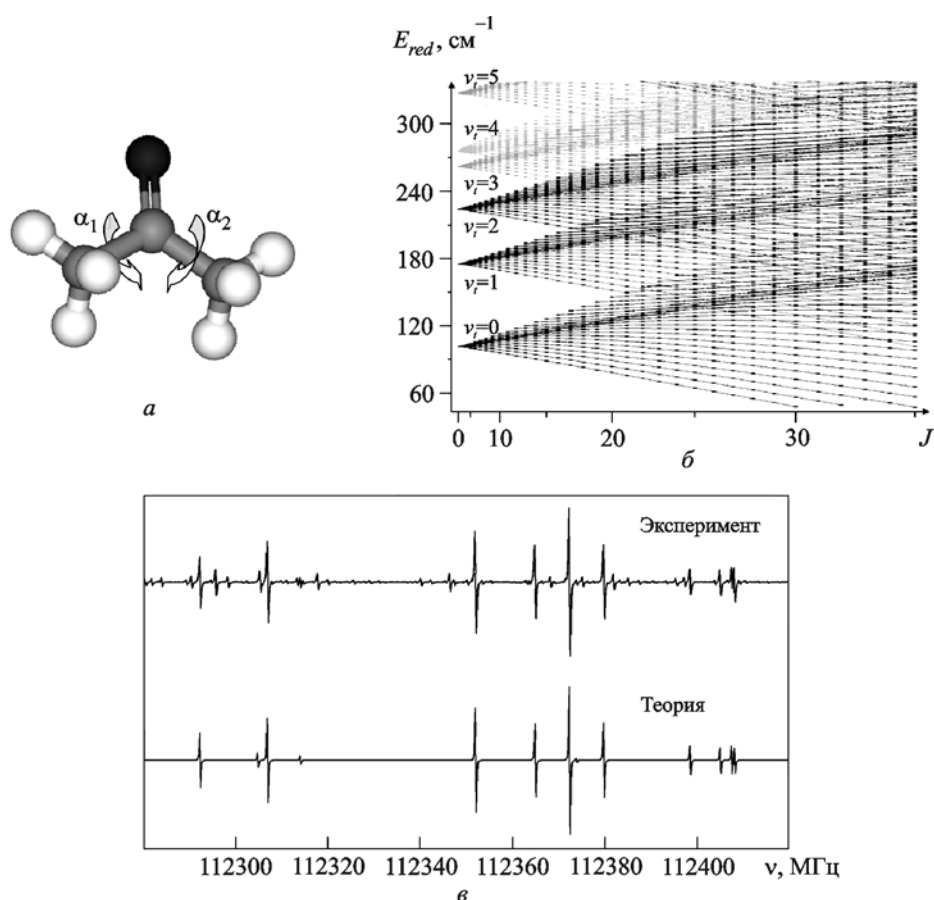


Рис. 5. Структура молекулы ацетона (а); энергетическая диаграмма уровней энергии молекулы ацетона, имеющей G симметрию (б); сравнение наблюдаемого спектра молекулы ацетона с теоретически предсказанным (в)

собственных значений энергии системы пропорционально кубу ее размерности.

На практике ограничиваются некоторым усе-
щенным вариантом гамильтониана, включая толь-
ко те состояния, которые важны для описания
наблюдаемого спектра. Так, в случае торсионно-
го колебания одной метильной группы, например
в молекуле метанола, применяют метод Ро осей
и двухступенчатую диагонализацию. Суть мето-
да Ро осей заключается в таком выборе молеку-
лярно фиксированной системы координат, кото-
рый бы, в нулевом приближении, исключил все
компоненты кориолисова взаимодействия внут-
реннего вращения метильной группы и вращения
молекулы как целого, кроме одной, направленной
вдоль оси z . В этом случае торсионная задача
диагональна по отношению к квантовому числу
 K проекции вращательного углового момента
системы на выбранную молекулярно фиксирован-
ную ось. Это позволяет для каждого значения K
решить торсионную часть задачи в расширенном

базисе, а затем, на втором этапе диагонализации,
когда полностью учитывается влияние враща-
тельного движения молекулы, существенно со-
кратить число рассматриваемых торсионных ко-
лебательных состояний. Так, в случае метанола,
для описания спектров первых трех торсионных
состояний на первом этапе диагонализации вклю-
чают в рассмотрение 21 торсионное состояние,
в то время как на втором – только 9 ($n_{v_t} = 9$).

В случае молекулы ацетона невозможно выб-
рать такую молекулярно фиксированную систему
координат, которая бы одновременно реализовы-
вала метод Ро осей для обеих метильных групп.
Это приводит к существенному увеличению коли-
чества торсионных состояний, которые необходимо
рассматривать на втором этапе диагонализации.
Выбор уровня отсечения обычно осуществляют
в результате численных экспериментов, когда до-
бавление новых торсионных состояний, лежащих
на более высоких энергетических уровнях, не влияет
на рассчитанные значения уровней энергии в низ-

колежащих состояниях, которые и являются предметом спектроскопического исследования. Численный эксперимент показал, что в случае ацетона, для которого в данный момент исследуются спектры первых трех торсионных состояний, минимальное значение $n_{vt} = 36$ (при этом все еще наблюдается влияние отсекаемых более высоколежащих торсионных состояний), в то время как оптимальным является значение $n_{vt} = 55$. Здесь следует отметить, что развитие радиоастрономии в субмиллиметровом и терагерцовом диапазонах требует исследования спектров молекул для достаточно высоких значений квантового числа J . В итоге приходится иметь дело с диагонализацией матриц вплоть до размерности порядка 10^4 , плюс к этому повышаются требования к объему доступной памяти, поскольку расчеты ведутся с использованием переменных с двойной точностью и необходимо сохранять информацию не только о собственных значениях, но и о собственных векторах системы для нескольких значений J одновременно. Эти факторы, а также ограниченный объем оперативной памяти персонального компьютера (фактически задача перестала “помещаться” в памяти начиная с $J = 41$ при $n_{vt} = 36$) обусловили необходимость перенесения расчетов на грид-кластер РИ НАНУ.

Реализованная в лаборатории миллиметровой и субмиллиметровой радиоспектроскопии программа обработки спектров молекул с двумя эквивалентными метильными группами и C_{2v} равновесной конфигурацией была перенесена на грид-кластер РИ НАНУ и использована для расчетов спектра молекулы ацетона в диапазоне значений вращательного квантового числа J вплоть до 60 (максимальное значение J для опубликованных данных по спектру этой молекулы). На рис. 5, б приведена энергетическая диаграмма уровней энергии молекулы ацетона, имеющей G симметрию. Видно что уже со сравнительно небольших значений квантового числа J вращательные уровни энергии, принадлежащие различным торсионным состояниям, начинают взаимное проникновение, что приводит к дополнительным возмущениям структуры энергии молекулы за счет межторсионных взаимодействий. Именно корректный учет этих межторсионных взаимодействий и позволил нам получить описание миллиметрового и субмиллиметрового спектра первых трех торсионных состояний молекулы ацетона на уровне

точности имеющихся измерений. Так, полученное нами среднеквадратичное отклонение экспериментальных данных от расчетных для второго торсионного состояния молекулы ацетона в 6 раз меньше, чем результат предыдущего исследования спектра этого состояния, проведенного в университете Миссури (США) [8]. Основным отличием нашего подхода является использование двумерной потенциальной функции взаимодействия метильных групп с остовом молекулы и друг с другом в явном виде, а также учет в явном виде взаимодействия между торсионными состояниями в молекуле. Именно второй фактор является решающим, хотя он приводит к существенным затратам машинного времени. Так, на сегодняшний день мы использовали уже порядка 8 недель компьютерного времени одной из машин грид-кластера РИ НАНУ.

На рис. 5, в представлено сравнение наблюдаемого спектра молекулы ацетона в окрестности частоты 112 ГГц с предсказанным с использованием нашей модели этой молекулы. Видно, что для наиболее сильных линий спектра согласие довольно хорошее, хотя есть целый ряд еще неидентифицированных линий. Мы надеемся, что дальнейшее изучение спектра молекулы ацетона с использованием нашей модели позволит существенно расширить исследованный диапазон квантовых чисел и обеспечить радиоастрономические наблюдения межзвездного пространства под робным опорным атласом частот спектра этой молекулы. Мы планируем также исследовать спектр аналогичной астрофизической молекулы – диметилэфира. Решение этих задач потребует дальнейшего использования грид-кластера РИ НАНУ.

3.4. Создание специализированных астрономических баз данных и виртуальной обсерватории

С 2012 г. грид-сервер РИ НАНУ используется для обработки изображений, получаемых на оптических телескопах в программе автоматизированного обнаружения астероидов и комет CoLiTec сети ISON (International Scientific Optical Network). В качестве входных данных в программе используется серия ПЗС-кадров оптических телескопов (обсерватория ISON-NM, Россия (находится в США, штат Нью-Мексико); обсерватория ISON-Кисловодск, Россия; Андрушевская астрономическая обсерватория, Украина) с изображениями участ-

ков небесной сферы, а также опорный звездный каталог. Необходимость автоматического управления телескопами через Интернет, работы блока сверки найденных кандидатов с известными в Центре малых планет (США) и с базой наблюдений (~10 ТБ) делают грид-сервер РИ НАНУ очень удобным для работы этой программы.

Следует отметить, что благодаря разработанной программе [<http://neoastrasoft.com/main/>] 10 декабря 2010 г. российский астроном Л. Еленин, научный сотрудник Института прикладной математики имени Келдыша, ведущий наблюдатель обсерватории ISON-NM, открыл комету C/2010 X1 (Elenin), ставшую первой кометой, открытой российским астрономом за последние 20 лет. 21 сентября 2012 г. в обсерватории ISON-Кисловодск В. Невским и А. Новичонком была открыта комета C/2012 S1 (ISON), блеск которой к декабрю 2013 г. может сравняться с яркостью Луны в полнолуние. К настоящему времени в трех обсерваториях ISON благодаря использованию программы CoLiTec открыто более 1000 астероидов.

3.5. Другие задания

Большой объем проведенных работ был посвящен разработке каталога источников, усовершенствованию интерактивной среды виртуальной обсерватории [9], созданию баз данных.

Расчет параметров антенн для разных диапазонов длин волн – от декаметрового до миллиметрового – ведется достаточно интенсивно. От 2 до 6 узлов кластера используются для этой цели.

Работа одного из узлов была более месяца посвящена решению задач диффракции на объемных периодических структурах, фотонных кристаллах и задачам разработки метаматериалов. Узлы кластера были загружены всей совокупностью перечисленных задач на 80 ÷ 100 %.

Кроме того, удобство работы на грид-сервере как комплексе мощных компьютеров с большими объемами оперативной памяти позволило многим отделам РИ НАНУ использовать его для решения различных научных задач.

На стадии разработки электронный каталог молний на планетах Солнечной системы и новый каталог пульсаров.

В 2013 г. был создан сайт “кропов” [<http://crops.gian.kharkov.ua>]. Его цель – визуализация данных обсерваторий для пользователей с ограниченной пропускной способностью каналов связи.

В процессе создания находится сервис-публикатор для автоматической систематизации данных оптической астрономии.

4. Выводы

Благодаря использованию грид-технологий удалось успешно решить целый ряд научных задач. Так, в десятки раз удалось ускорить обработку данных обзора Северного неба и автоматизировать процедуру вычислений, в сотни раз ускорить численные расчеты движений в задаче многих тел, построить модели молекул с внутренними молекулярными колебаниями большой амплитуды, которые без использования оперативной памяти ВС грид-узла были неосуществимы. Благодаря увеличению производительности грид-кластера значительно ускорился процесс решения задач дифракции для объемных периодических структур, фотонных кристаллов, задач разработки метаматериалов. Кроме того, возросли возможности хранения больших объемов информации в задачах обработки изображений, поиска астрономических источников и т. д. Записаны данные более 70 % обзора Северного неба с целью поиска пульсаров и транзиентных источников в ближайшем галактическом окружении. Проводится их обработка. Создана карта яркостной температуры фона Северного неба в декаметровом диапазоне в международных VoTable и FITS форматах, приспособленных для общего пользования с помощью веб-технологий. Каталог расширен разделами, посвященными молниям в атмосфере Сатурна и пульсарам в декаметровом диапазоне, полученными за счет возможностей обработки больших массивов данных. Начато создание системы “Специализированная виртуальная обсерватория” с привлечением данных, получаемых в оптическом диапазоне. Продолжение этой работы позволит сделать систему интерактивной и удобной в использовании, значительно расширить ее наполнения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Державна цільова науково-технічна програма впровадження і застосування грид-технологій на 2009–2013 роки // Офіційний вісник України. – 2009. – № 75. – С. 2556.
2. Ткачов В.М., Кулішенко С.Ф. Використання ГРІД-технологій при обробці радіоастрономічних даних // Матеріали 16-го Міжнародного молодіжного форуму “Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке”, 17-19 апреля 2012 г. – Харьков (Украина). – 2012. – С. 122–123.

3. Yi Chen, Zhi Qiao, Spencer Davis, Hai Jiang, and Kuan-Ching Li. Pipelined Multi-GPU MapReduce for Big-Data Processing. – In: R. Lee, editor. Computer and Information Science. – Springer Int. Publ., 2013. – P. 231–246.
4. Zakharenko V. V., Vasylieva I. Y., Konovalenko A. A., Ulyanov O. M., Serylak M., Zarka P., Griefmeier J.-M., Cognard I., and Nikolaenko V. S. Detection of decameter wavelength pulse radio emission of 40 known pulsars // Mon. Not. R. Astron. Soc. – 2013. – Vol. 431, Is. 4. – P. 3624–3641.
5. Belleman R., Bedorf J., and Zwart S. High Performance Direct Gravitation N-body simulation on Graphics Processing Units II: An Implementation in CUDA // New Astron. – 2008. – Vol. 13, No. 2. – P. 103–112.
6. Bannikova E. Yu., Vakulik V. G., and Sergeev A. V. N-body simulation of a clumpy torus: application to active galactic nuclei // Mon. Not. R. Astron. Soc. – 2012. – Vol. 424, Is. 2. – P. 820–829.
7. Plummer H. C. On the problem of distribution in globular star clusters // Mon. Not. R. Astron. Soc. – 1911. – Vol. 71. – P. 460–470.
8. Groner P., Medvedev I. R., De Lucia F. C., and Drouin B. J. Rotational spectrum of acetone, CH₃COCH₃, in the H₁₇ torsional excited state // J. Mol. Spectrosc. – 2008. – Vol. 251, Iss. 1–2. – P. 180–184.
9. Вавилова И. Б., Пакуляк Л. К., Процюк Ю. И., Вирун Н. В., Шляпников А. А., Кацуба С. Г., Пухун А. И., Андриевский С. М., Мажаев А. Э., Казанцева Л. В., Шульга А. В., Золотухина А. В., Сергеева Т. П., Мирошниченко А. П., Андронов И. Л., Бреус В. В., Вирнина Н. А. Украинская виртуальная обсерватория (УкрВО). Современное состояние и перспективы развития объединенного архива наблюдений // Космическая наука и технология. – 2011. – Т. 17, № 3. – С. 74–91.

В. М. Ткачов¹, В. В. Захаренко¹, Я. Ю. Васильева¹,
Ю. А. Царин¹, О. Ю. Баннікова¹, В. В. Люшин¹,
В. С. Саваневич², О. В. Герасименко², О. Б. Анненков³,
С. Ф. Кулішенко¹, Д. Ф. Кулішенко¹

¹Радіоастрономічний інститут НАН України,
вул. Червонопрапорна, 4, м. Харків, 61002, Україна

²Харківський національний університет радіоелектроніки,
пр. Леніна, 14, м. Харків, 61166, Україна

³Запорізький інститут економіки та інформаційних технологій,
вул. Кіашко, 16-Б, м. Запоріжжя, 69041, Україна

ВИКОРИСТАННЯ ГРІД-ТЕХНОЛОГІЙ У РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ РАДІОФІЗИКИ ТА РАДІОАСТРОНОМІЇ

Для розв'язання складних та ресурсомістких наукових і прикладних завдань все ширше використовуються так звані

розподілені обчислення. Одним з напрямків їх розвитку є грід-технології. Вони дозволяють ефективно і надійно управляти комп'ютерними ресурсами, включеними до загальної мережі. Український академічний грід об'єднує обчислювальні потужності та ресурси зберігання даних понад 30 науково-дослідницьких інститутів НАН України. Це забезпечує функціональне середовище, що дозволяє вирішувати широкі коло наукових завдань.

У роботі надаються результати використання грід-інфраструктури, створеної в Радіоастрономічному інституті Національної академії наук України, для числового розв'язку задач у різних галузях радіоастрономії, астрофізики і радіофізики. Запропоновано також перспективні напрямки ширшого використання паралельних обчислень у наукових дослідженнях.

В. М. Ткачов¹, В. В. Зажаренко¹, Я. Ю. Васильева¹,
Ю. А. Царин¹, Е. Ю. Баннікова¹, В. В. Ілюшин¹,
В. С. Саваневич², О. В. Герасименко², О. Б. Анненков³,
С. Ф. Кулішенко¹, Д. Ф. Кулішенко¹

¹ Institute of Radio Astronomy, National Academy
of Sciences of Ukraine,
4, Chervonopraporna St., Kharkiv, 61002, Ukraine

² Kharkiv National University of Radio Electronics,
14, Lenin Av., Kharkiv, 61166, Ukraine

³ Zaporizhzhya Institute of Economics
and Information Technologies,
16-b, Kiyashko St., Zaporizhzhya, 69041, Ukraine

USING GRID-TECHNOLOGIES FOR SOLVING PROBLEMS IN RADIO PHYSICS AND RADIO ASTRONOMY

The so-called distributed computing is often used to solve complex and demanding scientific and applied problems. Grid technologies are among the areas of their development. They allow to efficiently and reliably manage computer resources plugged into the network. Ukrainian Academic Grid consolidates the computing power and storage resources of more than 30 research institutes of NAS-Ukraine. This ensures functional environment, which provides solution of a wide range of scientific problems.

The paper presents the results of the use of grid infrastructure created in the Institute of Radio Astronomy of National Academy of Sciences of Ukraine for numerical solving of problems in various fields of astronomy, astrophysics and radio physics. Promising areas of wider use of parallel computing in scientific research are proposed.

Стаття постуила в редакцію 28.05.2013