

УДК 681.3, 519.68, 524.7-77/33
№ держреєстрації 0112U004104

Інв. № _____

Національна академія наук України

Радіоастрономічний інститут

Червонопрапорна 4, Харків 61002, тел. 057 7061415

ЗАТВЕРДЖУЮ

Керівник ДЦНТП впровадження і
застосування грид-технологій
на 2009-2013 роки
академік НАН України

_____ А.Г. Загородній

«__» _____ 2012 р.

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор Радіоастрономічного інституту
академік НАН України

_____ Л.М. Литвиненко

«__» _____ 2012 р.

ЗВІТ ЗА ПРОЕКТОМ

«Адаптація грид інфраструктури РІНАНУ до передачі та обробки великих масивів радіоастрономічних даних»

виконаним в рамках Державної цільової науково-технічної програми
впровадження і застосування грид-технологій на 2009-2013 роки

Керівник ССР НОВ
к.ф.-м.н.

В.Л. Майстренко

Секретар координаційного комітету
ДЦНТП в НАН України,
д.ф.-м.н.

Є.С. Мартинов

Керівник проекту к.т.н.

В.В. Захаренко

Харків – 2012

Матеріали звіту розглянуто та затверджено Вченою радою Радіоастрономічного інституту
НАН України, протокол № 19 від 19.12.2012

ПЕРЕЛІК АВТОРІВ

Керівник НДР:

С.н.с., к.т.н.

Захаренко Вячеслав Володимирович

Відповідальні виконавці:

інженер-радіофізик

Ткачов Віталій Миколайович

пров. інженер-програміст

Кулішенко Сергій Федорович

пров. інженер-програміст

Кулішенко Дмитро Федорович

інженер-електронік 2 кат.

Яровой Олександр Григорович

РЕФЕРАТ

Звіт по НДР: 29 стор., 12 рис., 2 табл., 4 джерела.

Мета проекту. Розвиток використання грід-технологій для обробки даних радіоастрономічних спостережень та апробація використання програмних засобів для обробки астрономічних (оптичних) даних в умовах гріда. Розробка програмного забезпечення, яке застосовує можливості CUDA технологій для паралельної обробки радіоастрономічних даних. Продовження створення віртуальної радіоастрономічної грід-обсерваторії на базі існуючого каталогу радіоджерел в декаметровому діапазоні в плані розширення розділами блискавок Сатурну і даними обробки сигналів пульсарів. Модернізація існуючого кластеру РІ НАНУ: збільшення місткості сховищ даних та розвиток обчислювальних можливостей за рахунок застосування GPU процесорів. Шляхи створення каналу зв'язку РІ НАНУ з обсерваторією УТР-2.

Завдання і заходи Програми, які виконувалися в проекті

Завдання	Заходи
2. Розроблення і впровадження технологій функціонування грід-інфраструктури.	2.3 Дослідження і розробка методів і засобів об'єднання грід-технологій і технологій Веб-послуг, механізмів формування грід-послуги, як розширення Веб-послуги.
4. Розробка та впровадження грід-технологій в науково-технічну та соціально-економічну сфери діяльності.	4.1 Використання грід-технологій в фундаментальних наукових та науково-прикладних дослідженнях.
5. Розвиток засобів формування даних, їх збереження та інтелектуальної обробки, використання їх для створення різноманітних баз даних, що є елементами грід-інфраструктури.	5.2 Створення грід-банків даних (Розробка і створення грід-сховищ даних на основі кеш-серверних технологій для накопичення інформації і обробки даних).

Перелік завдань, як вони сформульовані в Технічному Завданні до проекту.

В 2012 році було заплановано:

1. Створити програмне забезпечення, для роботи інтерактивної обсерваторії (ІО) Північного неба.
2. Створити мапу яскравісної температури фону Північного неба в декаметровому діапазоні у міжнародних VoTable та FITS форматах, пристосованих для загального користування.
3. Запустити сервер паралельної обробки великих об'ємів радіоастрономічних даних на основі GPU (CUDA) технологій.

Що зроблено:

1. Модернізовано обчислювальний ґрид-кластер РІ НАНУ за рахунок розширення файлового простору.
2. Створено сервер паралельної обробки великих об'ємів радіоастрономічних даних на основі GPU (CUDA) технологій.
3. Створено мапу яскравісної температури фону Північного неба в декаметровому діапазоні у міжнародних VoTable та FITS форматах, пристосованих для загального користування за допомогою веб-технологій.
4. Каталог розширено розділами блискавок Сатурну і даними обробки сигналів пульсарів, отриманих за рахунок можливостей обробки більших масивів даних.
5. Започатковано створення системи «Спеціалізована віртуальна обсерваторія» із залученням оптичних даних.

Ключові слова: **радіо джерела, розподілена обробка даних, спостереження, веб-каталог, спеціалізована віртуальна обсерваторія, CUDA**

ЗМІСТ ЗВІТУ

ВСТУП	6
1. Наукова складова проекту	6
1.1. Обробка та зберігання даних декаметрового обзору Північного неба з метою пошуку пульсарів і транзієнтних джерел	7
1.2. Числові розрахунки в задачах багатьох тіл (N-body simulation) при моделюванні затінюючих торів в активних ядрах галактик	10
1.3. Спектроскопія астрофізичних молекул з декількома внутрішньомолекулярними коливаннями великої амплітуди: 2 еквівалентні метильні групи в молекулі з C_{2v} рівноважною конфігурацією	13
1.4. Створення баз даних і віртуальної обсерваторії. Інші завдання	17
2. Використання комп'ютерних ресурсів для отримання результатів проекту	20
3. Модернізація комп'ютерних ресурсів	23
3.1. Перелік обладнання, яке було закуплено	23
3.2. Загальна схема взаємодії елементів кластер-серверної системи обміну даними	23
4. Висновки	26
5. Перелік статей, що опубліковані за темою проекту, або є надісланими в наукові журнали, перелік доповідей, що зроблено на семінарах, конференціях	27
6. Додаток 1	28
а. Перелік завдань і заходів (за Програмою), що виконувались з зазначенням коштів, що використані для виконання кожного з них.	28
б. Використання комп'ютерних ресурсів для отримання результатів	28

ВСТУП

Радіоастрономічний інститут НАНУ є головною науковою організацією в Україні в галузі радіоастрономічних і радіофізичних досліджень космічного простору. Фундаментальними науковими напрямками інституту є розробка теорії та фізичних принципів створення радіотелескопів та удосконалення інструментальної бази для радіоастрономічних спостережень; проведення радіоастрономічних досліджень у широкому діапазоні радіохвиль; дослідження Землі та планет, навколоземного та міжпланетного простору засобами радіоастрономії та дистанційного зондування. Також інститут проводить дослідження в галузі теоретичної радіофізики, мікрохвильової спектроскопії, та прикладні дослідження і радіотехнічних систем в діапазоні надвисоких частот.

Державна цільова науково-технічна програма Впровадження и застосування грид-технологій дають інститутам Національної Академії Наук України можливість додаткового збільшення ресурсної бази, збільшення обчислювальних потужностей та обсягів доступних он-лайн даних. У структурі обладнання, що відповідає за зберігання і обробку даних Радіоастрономічного інституту НАН України, грид-сервер і весь Академічний грид відіграє все більшу роль.

1 Наукова складова проекту

Завдяки великим ресурсам та гнучким можливостям взаємодії з сервером коло завдань, що вирішується в інституті, постійно розширюється. Досить перерахувати лише найзначніші напрямки. Ними є:

- обробка та зберігання даних декаметрового огляду Північного неба з метою пошуку пульсарів і транзієнтних джерел;
- створення баз даних і віртуальної обсерваторії на основі отриманих результатів обробки спостережень;• розрахунок параметрів антен для різних діапазонів довжин хвиль - від декаметрового до міліметрового;
- чисельні розрахунки рухів в задачі багатьох тіл (N-body simulation) при моделюванні затіняючих торів в активних ядрах галактик;
- моделювання спектральних властивостей молекул з внутрішньо молекулярними коливаннями великої амплітуди;
- рішення задач дифракції для об'ємних періодичних структур, фотонних кристалів, завдань розробки метаматеріалів;
- використання можливостей зберігання великих обсягів інформації в задачах обробки зображень, пошуку астрономічних джерел і т.д.

Більше половини перерахованих напрямків стало можливим додати за поточний рік завдяки збільшеним можливостям грід-сервера і гнучкому управлінню ресурсами.

1.1. Обробка та зберігання даних декаметрового обзору Північного неба з метою пошуку пульсарів і транзієнтних джерел

Концепція декаметрового обзору Північного неба з метою пошуку пульсарів і транзієнтних джерел полягає у використанні добового обертання Землі та особливостей діаграми спрямованості радіотелескопа УТР-2. Використання даних за один добовий оборот з півгодинним перекриттям для пошуку всіх джерел з обраним схиленням забезпечує стеження за джерелом близько години. Очевидно, що накопичувати можна тільки повторювані сигнали. Для транзієнтних чутливість буде дорівнює миттєвій, але поле зору радіотелескопа буде визначатися видом сумарної діаграми («хрест», діаграма $30' \times 15^\circ$ зі сходу на захід і $1^\circ \times 15^\circ$ з півночі на південь), яка більше перемноження ($30' \times 30'$) приблизно в 100 разів.

При ширині кожного з 5 променів близько $30'$ і зсувом центрів на $30'$ за 24 години виконується огляд смуги шириною $\sim 2.5^\circ$ по δ . Діапазон схилень $-10^\circ \dots 90^\circ$ покривається за ~ 40 діб. Значення схилень -10° вибрано з умови падіння ефективної площі в 2 рази. Координати джерела по прямому сходженню (за умови достатнього співвідношення «сигнал/шум») можуть бути відновлені, використовуючи різницеву або перемножену діаграму спрямованості.

Часова роздільна здатність обзору (8 мс) обрана з урахуванням розсіювання в декаметровому діапазоні. Тільки кілька відомих пульсарів мають час розсіювання менше 8 мс. Для всіх інших навіть сигнал з нульовою тривалістю через багатопроменеве поширення в міжзор'яному середовищі буде «розмазаний» по часу. Періоди шуканих пульсарів потрібно вибирати більш декількох відліків вибраної роздільної здатності. Таким чином, періоди обмежуються значенням $> 50 \dots 100$ мс.

Спочатку планується досліджувати сигнали в межах мір дисперсії (DM) в інтервалі $0 \dots 30$ пк/см³ для пошуку повторюваного випромінювання і $0 \dots 60$ пк/см³ для пошуку транзієнтного випромінювання з кроком 0.01 пк/см³. Надалі діапазон оброблюваних мір дисперсії буде розширено.

Для запису і подальшої обробки даних обзору необхідно 80 Тб дискового простору для постійного зберігання та близько 20 Тб для зберігання проміжних результатів конвеєрної обробки даних. В даний час використовується близько 40 Тб на дисках грід-сервера і ведеться розробка і тестування процедур конвеєрної обробки для запуску їх в режимі паралельних обчислень.

Перед початком поточного обзору був виконаний попередній вкрай важливий етап - обзор відомих по високочастотним даними пульсарів. (Понад 90% обчислень виконано на грід-сервері РІНАНУ в 2011р.). На даний час відомо близько 2000 радіопульсаров. Максимум спектру випромінювання припадає на метрові хвилі. Але в діапазонах < 30 МГц (декаметри) і > 6 ГГц відомі тільки по кілька джерел. У сантиметровому діапазоні це пов'язано з падінням потоку в ступені $\alpha = -1.8 \dots -1.6$

частоти (f^α), а в декаметровому - до практично такого ж падіння потоку додається зростання фону Галактики ($\sim f^{-2.5}$) і збільшення рівня перешкод в десятки тисяч раз. Тому до наших спостережень залишалося незрозумілим, чи можливо виявлення додатково до вже відомих 10 пульсара в декаметровому діапазоні ще хоч якогось їх числа.

Удосконалення приймальної апаратури, методів очищення даних від перешкод, уточнення заходів дисперсії дозволили збільшити це число до 40, причому не з усіх ~ 2000 пульсарів, які недоступні для спостережень як імпульсні джерела внаслідок розсіювання, а з повної вибірки 74-х близьких джерел з $DM < 30$ пк/см³. Таким чином, «детектуємість» (відношення продетектованих до відомих) пульсарів у декаметровому діапазоні (55%) перевищила половину [1]. Якщо врахувати, що в цих же дослідженнях було підтверджено розширення профілю середнього імпульсу на низьких частотах (частота 25 МГц) приблизно на 60-80% в порівнянні з профілями на 100 МГц, то можна очікувати відкриття десятків невідомих раніше джерел.

Розподіл часу спостережень на УТР-2 дозволив провести запис вже більше половини площі Північного неба в режимі обзору. На рис. 1.1 наведено області, спостереження яких виконано (зафарбовані смуги) і пульсари, відомі по високочастотним даними. Плюси - продетектовані в декаметровому діапазоні, ромби з інтервалом помилок - не продетектовані.

Обробка включає в себе очищення даних від перешкод (алгоритм очищення постійно вдосконалюється) і нормування з використанням калібрувальних даних. Після розрахунку часу дисперсійного запізнювання в міжзоряному середовищі для кожного з 4096 каналів приймача проводиться компенсація дисперсії. Пошук періодичностей проводиться за допомогою за допомогою перетворення Фур'є. Для потужних пульсарів можливе виявлення декількох десятків гармонік. Для більшості виявляються тільки перші кілька гармонік.

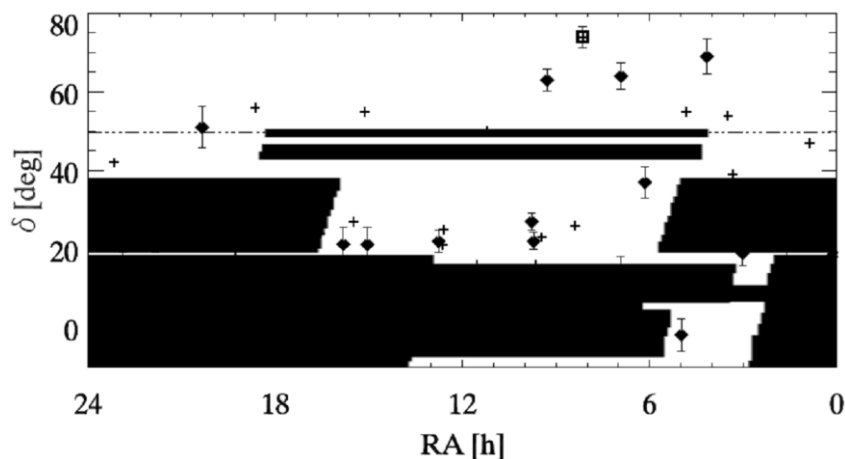


Рис. 1.1. Наведено області, спостереження яких виконано в режимі обзору (зафарбовані смуги) і пульсари, відомі по високочастотним даними: плюси - продетектовані в декаметровому діапазоні, ромби з інтервалом помилок - не продетектовані

Для пошуку невідомих пульсарів все повторюється від нульової міри дисперсії до 30 пк/см³ з кроком 0.01 пк/см³. Приклад результату такого пошуку, усередненого для декількох тисяч періодів пульсара (PSR B0031-07, час спостереження ~ 5400 с, період пульсара ~ 1 с) наведено на рис 1.2, а для індивідуальних імпульсів - на рис.1.3.

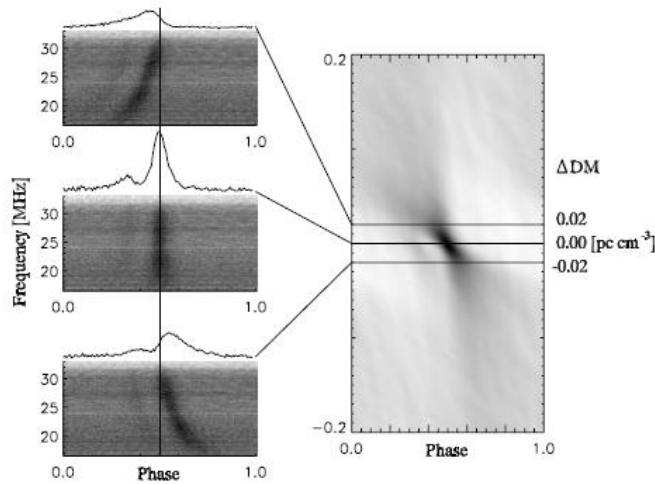


Рис. 1.2. Приклад результату пошуку усередненого для декількох тисяч періодів пульсара

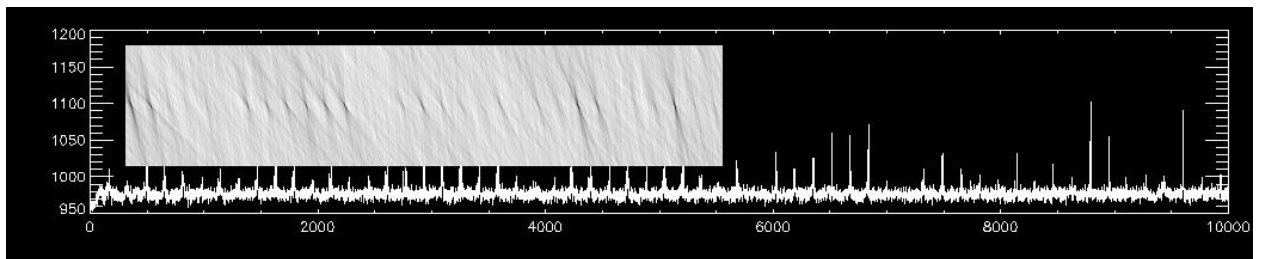


Рис. 1.3. Приклад пошуку індивідуальних імпульсів пульсарів або транзєнтів

Транзєнтні джерела будуть виглядати, як поодинокі імпульси пульсарів. Це дисперговані в міжзоряному середовищі короткі потужні імпульси, що породжуються процесами поблизу поверхні нейтронних зірок, чорних дір, акреції речовини на такі об'єкти, їх злиття і т.п.

Всі результати отримані за допомогою програмного забезпечення, розробленого для пошуку радіовипромінювання пульсарів. Однак, для відомих пульсарів уточнення міри дисперсії не вимагає великих витрат часу. Для пошуку невідомих імпульсних сигналів потрібно перебирати «пробні» значення DM з малим кроком, а для пошуку періодичностей необхідна спектральна або кореляційна обробка. Через це витрати часу на ці етапи обробки зростають в тисячі разів. Якщо для огляду відомих пульсарів було потрібно приблизно півроку машинного часу для обробки даних для 74-х джерел, то стає очевидною потреба в розпаралелюванні обчислень при обробці повного обзору Північного неба.

Очищення і нормування даних не вимагає розпаралелювання. Час очищення менше або дорівнює часу спостережень, тому воно легко вбудовується в конвеєрну обробку на обчислювальних потужностях радіотелескопу УТР-2. Другий етап - дедиспергування з усіма «пробними» значеннями міри дисперсії (3000 кроків) - вимагає обробки великих масивів даних (100-200 Гб), тому розпаралелювання в грід-середовищі найбільш ефективно між серверами, з якими сервер РІ НАНУ має найбільш швидкі лінії зв'язку. Це сервер ІРЕ та сервери інших академічних інститутів м. Харкова. Перші тести проводилися на грід-серверах РІ НАНУ та ІРЕ НАНУ. На грід-сервері РІ НАНУ час обробки по програмі пошуку склало в 2012 р. 4 місяці (вересень-грудень після установки і настройки в серпні 2012 сервера з локальним сховищем 20 Тб).

Наступне завдання - пошук періодичностей, як і чищення, не вимагає великих витрат часу. Він може бути розпаралелен, щоб швидше підготувати масив даних для більш глибокого аналізу в інтерактивному режимі. Остаточний багатопараметричний пошук проводиться з урахуванням залежностей різних властивостей радіовипромінювання пульсарів і характеристик середовища поширення.

Окремо існує задача моніторингу транзйєнтних подій. Для її вирішення потрібно он-лайн аналіз даних, що надходять під час спостережень, на предмет збігу якогось широкосмугового сигналу з однією з «пробних» ДМ. Для цього завдання попередня підготовка і обробка даних повинні проводитися набагато швидше, ніж в грід-середовищі. Єдиною технологією, яка може забезпечити таку швидкість «на місці» - на телескопі під час спостережень - є застосування графічних процесорів. Саме тому в закупленому обладнанні особливе місце відводилося придбання плат, що забезпечують такі можливості.

CUDA (Compute Unified Device Architecture) - уніфікована обчислювальна архітектура апаратних засобів, заснована на використанні графічних процесорів для паралельних обчислень, дозволяє істотно збільшити обчислювальну продуктивність. Розробка фірми NVIDIA, спочатку створена для масиву графічних процесорів (graphics processing unit, GPU), стала початком використання GPU в потужних обчислювальних системах. Побудова залежності «міра дисперсії від часу» он-лайн для коротких послідовностей вхідних даних, яка використовується для пошуку транзйєнтів, в даний час знаходиться в процесі налагодження.

1.2. Числові розрахунки в задачах багатьох тіл (N-body simulation) при моделюванні затінюючих торів в активних ядрах галактик.

Якщо порівнювати структуру задач, для яких виграш GPU максимальний, то максимальну ефективність мають алгоритми з багаторазовою обробкою обмеженого масиву даних [2]. У переліку завдань, що виконуються на грід-сервері РІ НАНУ, найбільший виграш при застосуванні обчислювальних можливостей графічних процесорів фірми NVIDIA досягається для таких програм, як розрахунок рухів системи багатьох тіл (N-body). Одним із структурних елементів активних ядер галактик є газопильовий тор, який складається з хмар, що рухаються в гравітаційному полі центральної маси. Дані спостережень вказують, що геометричний параметр тора

(r_0 - відношення малого радіусу до великого) порядку одиниці, тобто тор геометрично товстий. Пояснення механізму, який підтримує геометричну товщину тора (а не сплющує в диск), є одним з принципових питань астрофізики активних ядер галактик. До теперішнього часу проводилися моделювання тора в припущенні безперервно розподіленого середовища в ньому. В роботі [3] зроблений перехід від безперервної середовища до дискретного, тобто з урахуванням того, що тор складається з хмар, які здійснюють орбітальний рух навколо центральної маси. При цьому ми враховували не тільки вплив центральної маси (надмасивної чорної діри), але і самогравітацію тора. Дана задача зводиться до чисельного інтегрування рівнянь руху, які з урахуванням центральної маси мають вигляд:

$$\mathbf{a}_i = -\frac{GM_c}{R^2} \frac{\mathbf{r}_i}{r_i^3} + \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}, \quad (1)$$

Тут $\mathbf{a}_i$ - прискорення i -ої частки, що виникає за рахунок гравітаційної взаємодії всіх частинок системи. Сумарна гравітаційна сила, діюча на i -ту частку має вигляд:

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

де ε - параметр, який дозволяє виключити нескінченне зростання сили взаємодії двох частинок при їх тісному зближенні. Також, цей параметр означає, що ми моделюємо не точкові частки, а мега-частки, що представляють собою сферичні області (хмари), в яких розподіл щільності підкоряється закону Пламмера [4]. В якості початкових умов використовувалися умови для тора Кеплера даного геометричного параметра r_0 [3] з "включенням" гравітаційної взаємодії між частинками. Моделювання показує, що на кінцевий розподіл часток тора і форму його перерізу впливає тільки завдання початкового значення r_0 . Інші параметри визначають тільки час його релаксації.

З чисельного моделювання також впливає, що на початковому етапі (число оборотів, $t < 20$) відбувається сильні зміни кінетичної і потенційної енергії. Зміна потенційної енергії пов'язані зі зміною форми перерізу тора і щільності часток. Саме на цьому, достатньо короткому часовому інтервалі, розподіл часток у торі змінюється істотно, і він набуває рівноважний переріз, який має форму овалу. Деякі результати досліджень наведені на рис 1.4. Показана еволюція перетину торів з $r_0 = 0.5$ і масою тора 0.045, 0.056 і 0.070 від центральної маси. При цьому більш гострий кінець орієнтований до центральної масі, а більш плоска частина - до зовнішньої області. Це якраз протилежно початковому стану (кеплерівському тору). Тому очевидно, що істотні флуктуації енергії пов'язані з тим, що тор „прагне” до форми з перерізом, інвертованим по відношенню до початкового стану. При $t > 20$ флуктуації кінетичної і потенційної енергії стають незначними. Це означає, що в подальшому форма перерізу

тора істотно не змінюється. При цьому виконується умова теореми віріалу $E_{kin} + E_{full} = 0$, що характеризує стаціонарний або лінійно нестаціонарний стан системи.

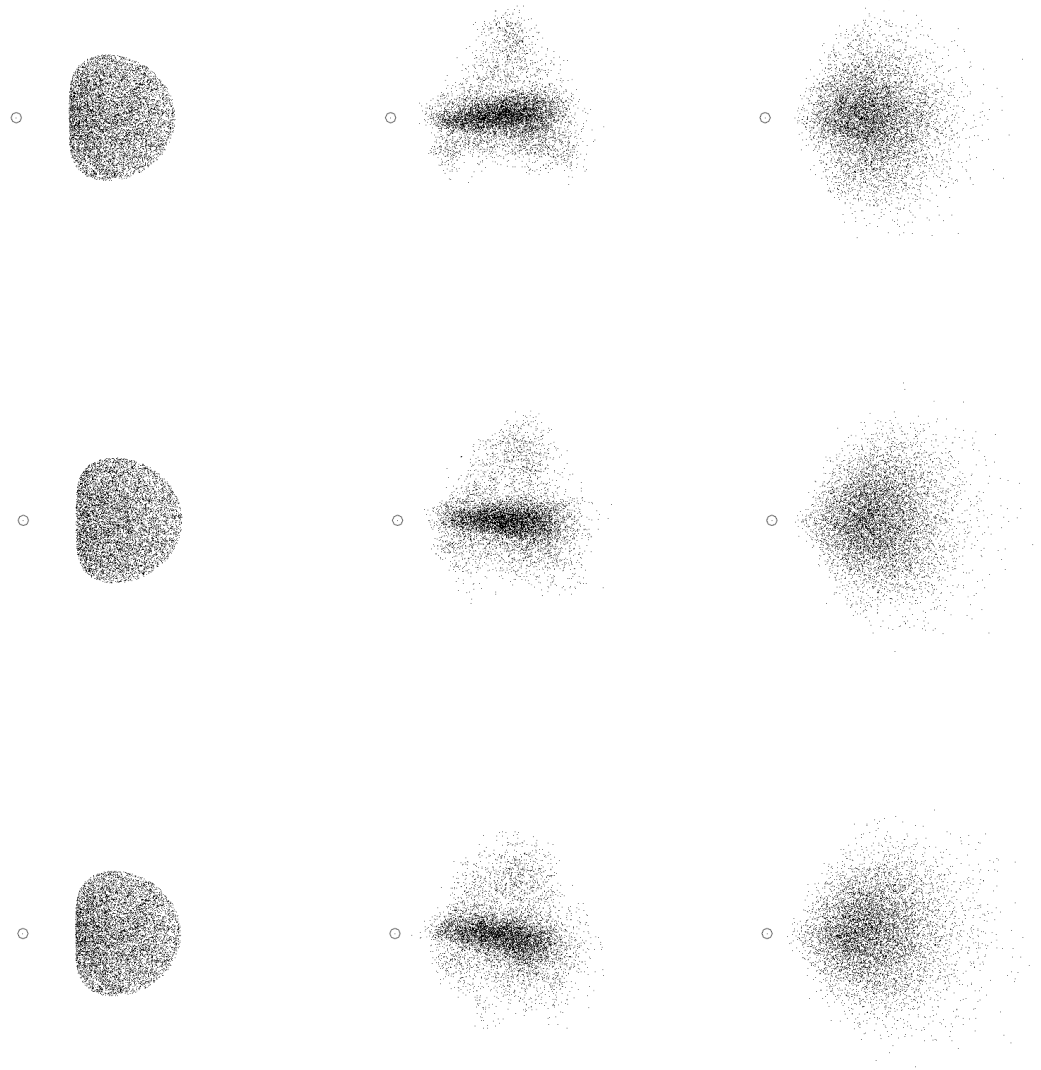


Рис. 1.4. Еволюція перерізу торів з радіусом $r_0 = 0.5$ і масою тора (зверху вниз) 0.045, 0.056 і 0.070 від центральної маси.

З рис.1.4 видно, що характерний розмір тора поступово збільшується з часом. Таке повільне "розповзання" перерізу тора пов'язано з іррегулярними силами, що виникають внаслідок гравітаційної взаємодії між частками.

Можна зробити локальний висновок, що в рівноважному стані орбіти часток в перерізі тора хаотизуються. Приклад розподілу нахилень і ексцентриситетів (початкового і після 1000 періодів) показаний на рис. 1.5.

При взаємодії часток одні з них втрачають енергію і переходять на більш низькі орбіти, а енергія інших збільшується, і вони переходять на більш віддалені орбіти або, набуваючи параболічну швидкість, навіть залишають систему. В результаті таких взаємодій зовнішня межа перетину тора постійно збільшується.

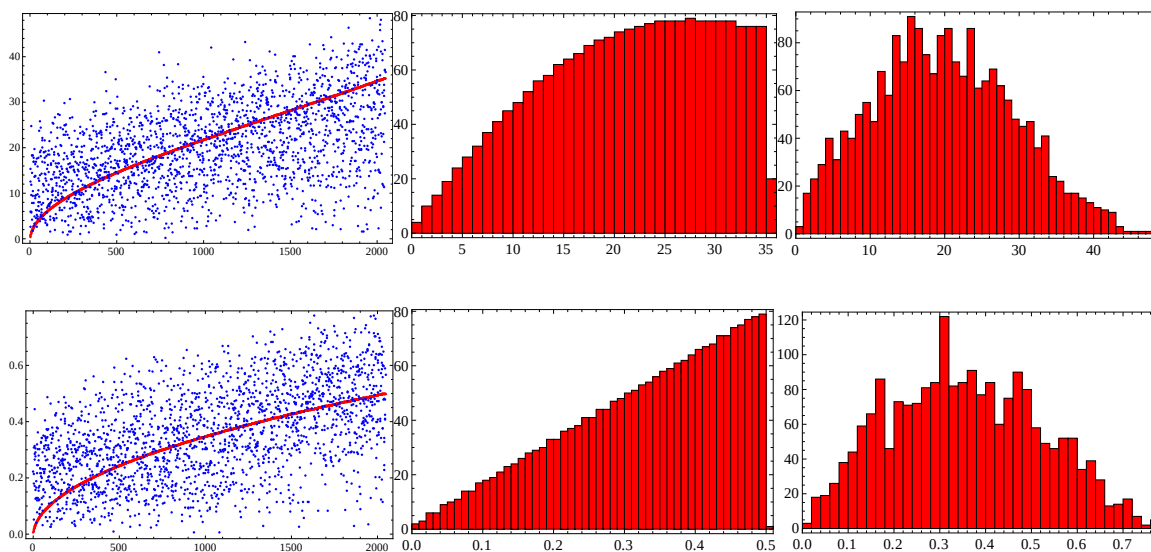


Рис. 1.5. Приклад розподілу нахилень (вгорі) і ексцентриситетів (внизу). На графіках ліворуч наведен розподіл: лінія - початковий, точки - кінцевий. Гістограми: зліва наведен початковий розподіл, праворуч - після 1000 періодів

Доказ стійкості такої складної двохзв'язної фігури, як гравітуючий тор [3], закладає основи нового підходу до вивчення затінюючих торів. Наступним етапом досліджень є моделювання подібних систем з різними стартовими параметрами. Їх може бути досить багато: співвідношення центральної маси і маси тора, малий радіус тора, об'ємна щільність і т.п. Вже отримане на відеокарті GTX 260 збільшення швидкості розрахунків в 90 разів у порівнянні з одним ядром процесора на грід-сервері давало всі підстави нарощувати обчислювальні потужності графічних процесорів в інфраструктурі кластера. В даний час для роботи доступні такі відеокарти: GTX 590 (відділ астрофізики), GTX 670 (2 шт. - грід-сервер РІ НАНУ), GTX 680 (сервер радіотелескопу УТР-2). Моделювання еволюції гравітуючих систем з великим числом параметрів моделі вимагає великих обчислювальних витрат. Сумарно по цьому завданню всі відеокарти працювали більше 12 міс.

Ці обчислення є основою для отримання інтегральних характеристик, таких як зміна кінетичної і потенційної енергії системи, ефективний розмір, елементи орбіт. Виходячи з узагальнених характеристик, можна говорити про стійкість системи, орієнтовний шлях еволюції і можливі характерні прояви. Висновки, отримані на основі розрахунків, будуть порівнюватися з даними спостережень.

1.3. Спектроскопія астрофізичних молекул з декількома внутрішньомолекулярними коливаннями великої амплітуди: 2 еквівалентні метильні групи в молекулі з C_{2v} рівноважною конфігурацією

Радіоастрономія мікрохвильового діапазону завжди була основним інструментом міжзоряної хімії, і лабораторна спектроскопія є її ключовою складовою частиною. Спектральний підпис речовини повинен бути вивчен в лабораторних умовах, перш ніж речовина може бути ідентифікована в міжзоряному середовищі. При цьому недостатньо просто отримати запис спектру в лабораторних умовах, необхідно провести його аналіз і опис в рамках відповідної моделі, яка дасть можливість змодельовати спектр для умов міжзоряного середовища. До одного з найцікавіших, з точки зору радіоастрономії, класів молекул відносяться молекули з внутрішньомолекулярними коливаннями великої амплітуди. Саме цей тип молекул відповідає за більшість спостережуваних спектральних ліній в міжзоряних хмарах. При цьому існують певні складнощі при теоретичному моделюванні спостережуваних спектрів таких молекул.

У даній роботі розглядаються молекули, що мають C_{2v} рівноважну конфігурацію і включають в свій склад дві еквівалентні C_{3v} групи. Прикладом таких молекул можуть служити такі виявлені в міжзоряному просторі молекули як ацетон $(CH_3)_2CO$ і діметилефір $(CH_3)_2O$. У цій роботі ми розглянемо приклад спектру молекули ацетону $(CH_3)_2CO$. У даній молекулі потенційний бар'єр внутрішньому обертанню двох еквівалентних метильних груп досить низький, що призводить до торсіонних коливань метильних груп великої амплітуди і відповідного розщеплення у спектрі. Схематично структура молекули представлена на рис.1.6. Базовий Гамільтоніан для такої молекули може бути представлений таким чином:

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

де α_1, α_2 відповідні торсіонні координати, а p_1, p_2 кутові моменти пов'язані торсіонним коливанням двох метильних груп; J_x, J_y, J_z - проекції повного кутового моменту молекули на молекулярно фіксовані осі координат; A, B, C - обертальні сталі молекул; F, F' - кінетичні коефіцієнти торсіонного руху, V_3, V_{33}, V'_{33} - параметри двовимірної потенційної функції взаємодії метильних груп з остовом молекули і одна з одною. Основна проблема з точки зору проведення розрахунків з використанням даної моделі Гамільтоніана, який явно використовує двовимірну потенційну функцію взаємодії метильних груп з остовом молекули і один одним, є проблема поділу обертальної та коливальної частини задачі, а точніше необхідність спільного опису обертання молекули як цілого і коливань великої амплітуди. У звичайних, напівжорстких асиметричних молекулах, обертальний і коливальний ступені свободи добре розділяються, що дає можливість окремого опису обертальних спектрів більшості коливальних станів. З точки зору чисельних розрахунків це означає, що розмірність матриці Гамільтоніана в базисі Ванга дорівнює приблизно $(2J+1)/4$, де J квантове число повного кутового моменту молекули. Неможливість поділу

обертальних ступенів свободи і молекулярних координат, що описують торсіонне коливання метильних груп, призводить до необхідності побудови матриці Гамільтоніана для прогресії коливальних станів асоційованих з даним коливанням великої амплітуди. Це приводить до істотного збільшення розмірності матриць Гамільтоніана, яка дорівнює $(2J+1) \cdot n_{vt}$, де n_{vt} - число коливальних станів, що включаються в розгляд. При цьому слід зазначити, що час діагоналізації матриць, з метою знаходження власних значень енергії системи, пропорційн кубу її розмірності.

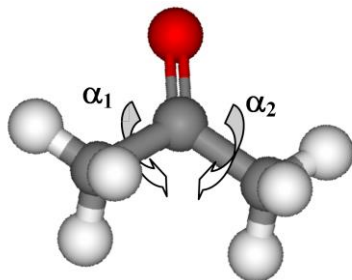


Рис.1.6. Структура молекули ацетона

На практиці обмежуються деяким усіченим варіантом Гамільтоніана, включаючи тільки ті стани, які важливі для опису спостережуваного спектру. Так, у разі торсіонного коливання однієї метильної групи, наприклад в молекулі метанолу, застосовують метод Ро осі і двоступеневу діагоналізацію. Суть методу Ро осі, полягає в такому виборі молекулярно фіксованої системи координат, який би, в нульовому наближенні, виключив всі компоненти Коріолісової взаємодії внутрішнього обертання метильної групи й обертання молекули як цілого крім однієї, спрямованої уздовж осі z . У цьому випадку торсіонна задача є діагональною по відношенню до квантового числа K проекції обертального кутового моменту системи на обрану молекулярно фіксовану вісь. Це дозволяє для кожного значення K вирішити торсіонну частину задачі в розширеному базисі, а потім на другому етапі діагоналізації, коли повністю враховується вплив обертального руху молекули, істотно скоротити число розглянутих торсіонних коливальних станів. Так, у випадку метанолу, для опису спектрів перших трьох торсіонних станів на першому етапі діагоналізації включають в розгляд 21 торсіонний стан, в той час як на другому тільки 9 ($n_{vt} = 9$).

У випадку молекули ацетону, неможливо вибрати таку молекулярно фіксовану систему координат, яка б одночасно реалізовувала метод Ро осі для обох метильних груп. Це приводить до істотного збільшення кількості торсіонних станів, які необхідно розглядати на другому етапі діагоналізації. Вибір рівня відсікання зазвичай здійснюють у результаті численних експериментів, коли додавання нових лежать вище за енергією торсіонних станів не впливає на розраховані значення рівнів енергії в низьколежачих станах, які і є предметом спектроскопічного дослідження. Чисельний експеримент показав, що в разі ацетону, для якого в даний момент досліджуються спектри перших трьох торсіонних станів, мінімальне значення $n_{vt} = 36$ (при цьому все ще відчувається вплив більш високолежачих торсіонних станів, що відсікаються), в той час як оптимальним є значення $n_{vt} = 55$. Тут слід зазначити, що розвиток радіоастрономії в субміліметровий і ТГц діапазони вимагає дослідження спектрів молекул для достатньо високих значень квантового числа J . У підсумку

доводиться мати справу з діагоналізацією матриць аж до розмірності порядку 10^4 , плюс до цього підвищуються вимоги до обсягу доступної пам'яті, оскільки розрахунки ведуться з використанням змінних з подвійною точністю і необхідно зберігати інформацію не тільки про власні значення, але й про власні вектори системи для декількох значень J одночасно. Ці фактори плюс відсутність у розпорядженні співробітників Лабораторії міліметрового і субміліметрового радіоспектроскопії комп'ютерів з об'ємом пам'яті більше 2 Гб (фактично задача перестала «вміщуватися» в пам'ять, починаючи з $J = 41$ при $n_{vt} = 36$) зумовили необхідність перенесення розрахунків на грід-кластер РІНАНУ.

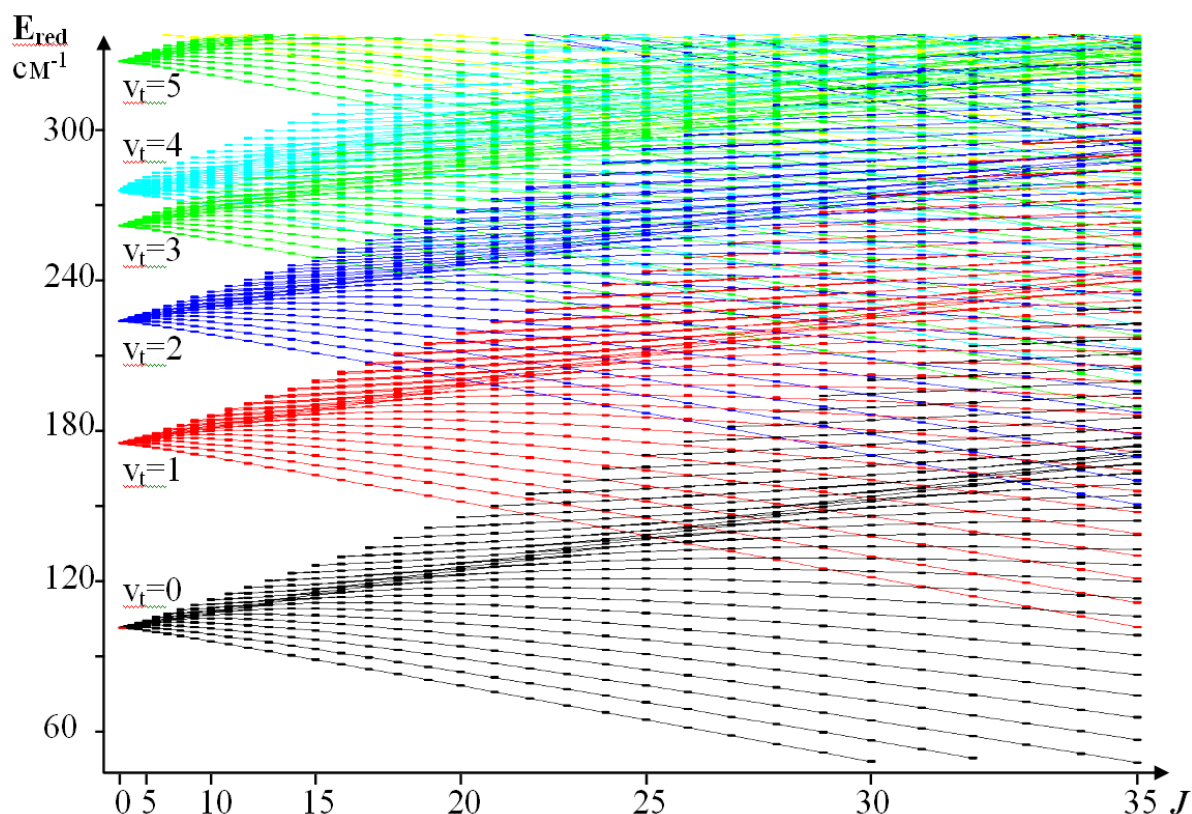


Рис. 1.7. Енергетична діаграма рівнів енергії G типу симетрії молекули ацетону для низьколежащих торсійних коливальних станів в діапазоні обертового квантового числа J від 0 до 35

Реалізована в Лабораторії міліметрового і субміліметрового радіоспектроскопії програма обробки спектрів молекул з двома еквівалентними метильними групами і C_{2v} рівноважною конфігурацією була перенесена на грід-кластер РІНАНУ і використана для розрахунків спектра молекули ацетону в діапазоні обертового квантового числа J аж до 60 (максимальне J для опублікованих даних по спектру даної молекули). На рис.1.7 наведена енергетична діаграма рівнів енергії молекули ацетону G типу симетрії. Видно, що, починаючи з порівняно невеликих значень квантового числа J , обертові рівні енергії, що належать різним торсійним станам, починають взаємне проникнення, що призводить до додаткових збурень структури енергії молекули, за рахунок межторсійних взаємодій. Саме коректний облік цих

межторсійних взаємодій і дозволив нам отримати опис міліметрового і субміліметрового спектру перших трьох торсійних станів молекули ацетону на рівні точності наявних вимірювань. Так, отримане нами середньоквадратичне відхилення експеримент - розрахунок для другого торсійного стану молекули ацетону, в 6 разів краще, ніж результати попереднього дослідження спектру цього стану, проведені в університеті Міссурі (США) [5]. Основною відмінністю нашого підходу є використання двовимірної потенційної функції взаємодії метильних груп з остовом молекули і один з одним в явному вигляді (див. вираз (3)), а також облік в явному вигляді взаємодії між торсійними станами в молекулі. Саме другий чинник є вирішальним, хоча він і призводить до істотних витрат машинного часу. Так, на сьогоднішній день ми використовували вже близько 8 тижнів комп'ютерного часу однієї з робочих станцій грід-кластера РІНАНУ.

На рис.1.8 представлено порівняння спостережуваного спектру молекули ацетону в районі 112 ГГц з спектром цієї молекули, що є передбаченим з використанням нашої моделі і програми. Видно, що для найбільш сильних ліній спектра узгодження є досить гарним, хоча є цілий ряд ще не ідентифікованих ліній. Ми сподіваємося, що подальше вивчення спектру молекули ацетону з використанням нашої моделі, дозволить істотно розширити досліджений діапазон квантових чисел і забезпечити радіоастрономічні спостереження міжзоряного простору докладним опорним атласом частот спектру цієї молекули. Також, ми плануємо дослідження спектру аналогічної астрофізичної молекули – диметилефіру. Вирішення цих завдань вимагатиме подальшого використання грід-кластера РІНАНУ.

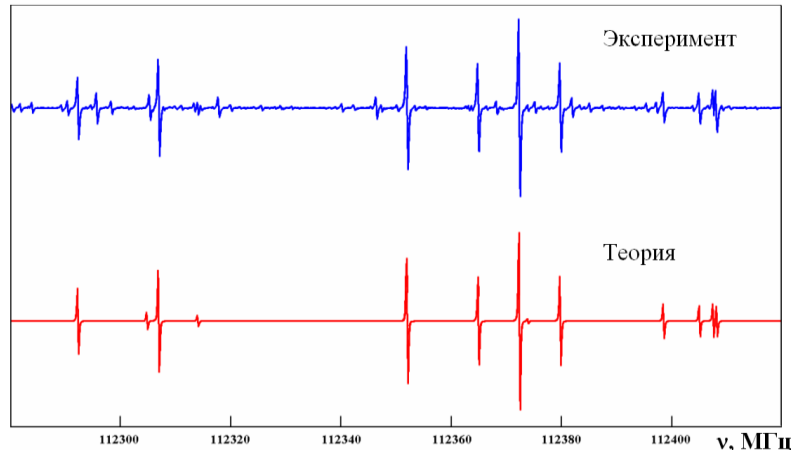


Рис.1.8. Спектр молекули ацетону в районі 112 ГГц

1.4. Створення баз даних і віртуальної обсерваторії. Інші завдання

З 2012 року грід-сервер РІ НАНУ використовуються для обробки зображень оптичних телескопів в програмі автоматизованого виявлення астероїдів і комет CoLiTec мережі ISON (International Scientific Optical Network). В якості вхідних даних в програмі використовується серія ПЗС-кадрів оптичних телескопів (ISON-NM Observatory, Росія, розташована в США, штат Нью-Мексико, ISON-Кисловодськ, Росія; Андрушівської астрономічної обсерваторії, Україна) із зображеннями ділянок

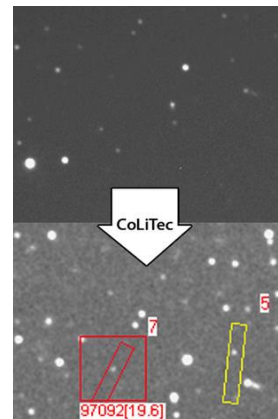
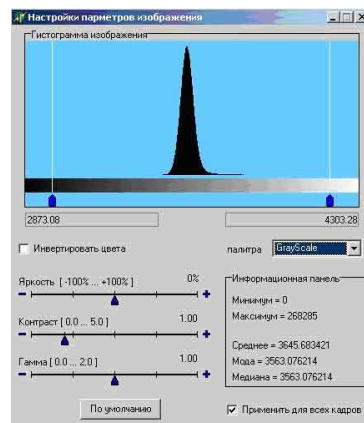
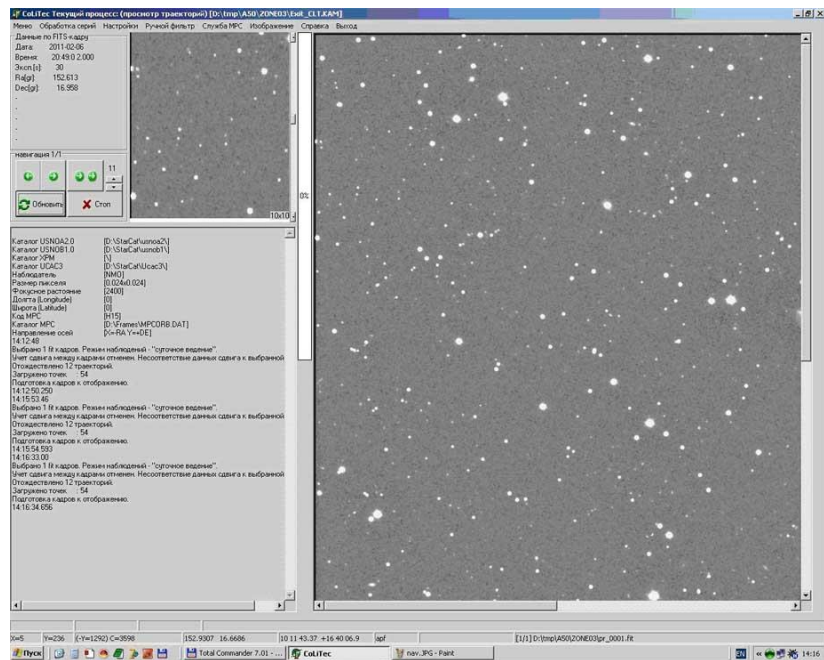


Рис. 1.10. Головное окно программы ColiTec, выювер і результат роботи

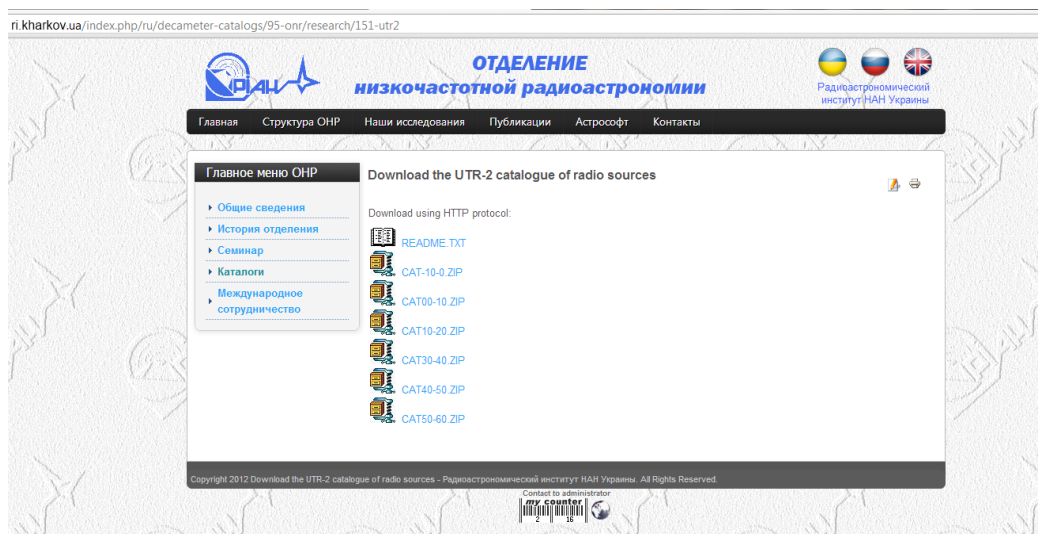


Рис. 1.11. Скріншот сторінки Відділення низькочастотної радіоастрономії РІ НАНУ з каталогом джерел УТР-2.

Література

1. Zakharenko V.V., Vasylieva I.Y., Konovalenko A.A., Ulyanov O.M. et al. Detection of decameter wavelength pulse radio emission of 40 known pulsars. MNRAS. подано в друк.
2. Belleman R., Bedorf J & Zwart S., 2008, New Astron., 13, 103
3. Bannikova E.Yu.; Vakulik V.G.; Sergeev A.V., N-body simulation of a clumpy torus: application to active galactic nuclei, 2012, MNRAS. 424, 820
4. Plummer, H. C., On the problem of distribution in globular star clusters, 1911, MNRAS, 71, 460
5. P. Groner, I. R. Medvedev, F. C. De Lucia, B. J. Drouin, 2008 J. Mol Spectrosc., 251, 180.

2 Використання комп'ютерних ресурсів для отримання результатів проекту

а. Необхідність використання обчислень для отримання результатів (оцінки потрібного обсягу ресурсів, часу обчислень)

На першому етапі (2011 р.) були оброблені дані спостережень 20 квадратних градусів з 500 значеннями міри дисперсії. Це потребувало півроку обробки на одній робочій станції. На теперішньому етапі належить обробити 10 тис. квадратних градусів (а в подальшому - близько 25 тис.), і 3000 пробних кроків по мірі дисперсії. Відповідно, потреби в обчислювальних потужностях/часі обчислень зростають на чотири порядки. Етап дедіспергування з усіма «пробними» значення міри дисперсії вимагає обробки масивів даних розміром 100-200 Гб – 12 або 24 години безперервних спостережень, тому розпаралелювання в ґрид-середовищі найбільш ефективно між серверами, з якими сервер РІ НАНУ має найбільш швидкі лінії зв'язку. Це сервер ІРЕ та сервери інших академічних інститутів м. Харкова. Перші тести проводяться на ґрид-серверах РІ НАНУ та ІРЕ НАНУ. На ґрид-сервері РІ НАНУ час обробки по програмі Survey склало в 2012 р. 4 місяці (вересень-грудень після установки и настроювання в серпні 2012 сервера з локальним сховищем 20 Тб). Надсилання цих задач в глобальний ґрид на даному етапі вважаємо недоцільним.

Доцільніше на етапі дедіспергування провести обробку за допомогою графічних процесорів (локальний кластер, програма в стадії налагодження). Паралельну обробку в глобальному ґріді провадити пізніше, оскільки результати для різних мір дисперсії можуть оброблятися незалежно.

Потреба в сумарній потужності графічних процесорів розрахована, виходячи зі співставлення потужності процесорів в системі пошуку транзієнтів ARTEMIS (LOFAR, 2 відеокарти GTX 580) і росту складності on-line дедіспергування при зниженні частоти (куб від відношення частот $(100/25)^3 = 64$). Тобто є потреба в десяти-двадцятикратному нарощуванні потужностей GPU. Потреба в сховищах на дисках складає ~ 70 Тб. Інші задачі потребують додатково 40...50% обчислювальних можливостей робочих станцій.

b. Стислий перелік необхідного прикладного програмного забезпечення.

Ми використовували PGCC, GCC та G77 компілятори для обробки даних під Linux. Також було використано Delphi-7 компілятор для тестових робіт з даними оптичної астрономії (в рамках використання ПЗ «COLITEC»).

c. Адаптація цього ПЗ (якщо необхідно) до використання ґрід-технологій, Не було необхідно.

d. Яким чином використовувалась ґрід-інфраструктура (українська, або інша). Якого типу ґрід-середовище (ARC, gLite) було використане.

Ми використовували як ґрід-кластер Радіоастрономічного інституту, який входить до Українського Академічного Ґріду, так і частково використовували ресурси, власне, УАГ. Кластер функціонує під nordugrid-arc-1.2.1 і globus-4.0.8-0.12.el5ng.

e. В якій віртуальній організації здійснювалися обчислення.

Проводилися тестові запуски обчислень на ґрід-кластері IPE НАНУ.

f. Перелік ґрід-користувачів, що брали участь в обчисленнях та їх DN Н/В.

g. Скільки задач було обчислено, на яких ґрід-кластерах, середній час обчислення одної задачі, загальна тривалість обчислень.

300 задач, приблизно 20...100 годин на задачу. Під задачі виділялось від однієї до чотирьох нод кластеру. Обчислення тривали рік. CUDA-1: на двох відеокартах обчислення тривали більше півроку.

h. Приклади завдань, мовою опису завдання, які відправлялися в ґрід для обчислень.

Тестові запуски обробки радіоастрономічних даних (ПЗС-файли).

i. Як ці програми та розроблені засоби можуть бути використані іншими користувачами. Чи є їх текстові описи та інструкції щодо використання. Де зберігаються програми, скріпти та текстові описи.

Наші програми призначено для обробки даних, отриманих від DSP процесорів і ПЗ, створених і/або налаштованих в нашому інституті [1]. Програми є

специфічними за призначенням, оскільки шукають слабкий сигнал пульсарів на тлі різноманітних радіоперешкод. Тому вони можуть бути цікавими лише користувачам, які отримують подібні за структурою дані на такому самому обладнанні. Програми зберігаються на кластері Радіоастрономічного інституту та локальних машинах наших користувачів.

ж. Які грід-сервіси, веб-портали, веб-сторінки тощо було розроблено і застосовано, або впроваджено.

Створено грід-розділ на веб-сайті інституту <http://www.ri.kharkov.ua/index.php/ru/general-information-grid>. Впроваджено використання веб-каталогу ультра-низькочастотних небесних радіоджерел телескопу УТР-2 <http://www.ri.kharkov.ua/decameter/utr2/>. В даний момент продовжується його адаптація. Створено дзеркало сайту каталогу EPN <http://www.ri.kharkov.ua/decameter/EPN/>. Інститут є учасником Української віртуальної обсерваторії <http://www.ukr-vo.org/>.

к. Які зміни необхідно зробити в грід-інфраструктурі України для того, щоб ваші завдання виконувалися більш ефективно.

Одною з головних проблем на шляху підвищення ефективності обробки даних спостережень в Радіоастрономічному інституті є відсутність високошвидкісного каналу зв'язку із Радіоастрономічною обсерваторією УТР-2. Використання низькошвидкісних каналів зв'язку суттєво обмежує потенціал української радіоастрономії і відштовхує на задній план. Нажаль, потенціальні провайдери в першу чергу керуються власними інтересами, ані ж інтересами української науки, і навіть участь інституту в Програмі інформатизації НАН і фінансування в рамках УНГ не врятувала в 2011-2012 рр. інститут від провалу в побудові такого каналу. Адже побудова такого каналу зв'язку – це значна сума коштів. Незважаючи на це інститут сподівається, що рано чи пізно тим чи іншим шляхом ми подолаємо цю перешкоду і УТР-2 буде підключено до Інтернету, європейськими астрономічними мережами і Українським академічним грідом. Ми вкотре сподіваємося на всебічну підтримку в цьому питанні Національної академії України як в рамках Державної цільової науково-технічної програми впровадження і застосування грід-технологій, так і поза її межами.

л. Чи використовуєте ви грід-інфраструктуру європейських проектів. Якщо так, то яких і наскільки інтенсивно.

Ні, хоча плануємо, коли з'явиться достатній канал зв'язку із обсерваторією УТР-2.

3 Модернізація комп'ютерних ресурсів .

Використання кластеру Радіоастрономічного інституту показало ефективність у вирішенні короткотермінових високоємнісних задач. Тому в рамках подальшого розвитку грид-інфраструктури РІ НАНУ вирішено було приділити увагу CUDA-технології обробки даних.

Було придбано сервер з наступними характеристиками: процесор Intel(R) Core(TM) i5-2500 CPU 3,30 ГГц, 16 Гб ОЗУ, графічна карта GTX 670 (2 шт.), 8x3 Тб HDD;

Крім того було:

1. виконано реконфігурацію грид-кластеру (після гарантійного ремонту). Тим самим було підвищено обчислювальні можливості, власне, кластеру;
2. проведено профілактичні заходи по відновленню акумуляторів в системі безперебійного живлення кластеру;

3.1. Перелік обладнання, яке було закуплено.

Кіл-ть	Найменування	Примітка
1	Сервер: i5 3300/6Mb, MB Asus P8P67Deluxe, 16Gb, 2xGTX 670, БП, корпус	Cuda-1
8	Жесткий диск 3 Тб Seagate Barracuda	

3.2. Загальна схема взаємодії елементів кластер-серверної системи обміну даними.

У Радіоастрономічному інституті НАН України в 2007 р. побудований обчислювальний кластер з продуктивністю 680ГФлопс при роботі з 64-х розрядними числами. Кластер базується на подвійних двопроцесорних платформах Superserver 6015T - INFV з двома процесорами Intel Xeon E5440 кожна. На усіх вузлах кластера, окрім керуючого, встановлена операційна система Linux 2.6.25 - gentoo - r7. Оптичними каналами зв'язку з пропускною можливістю 10 Гб/с кластер включений в логічну інфраструктуру інституту, грид-мережі НАН і мережі Інтернет. Кластер відповідає вимогам грид-вузла рівня Tier - 3 по прийнятій в ЦЕРНі термінології.

Технічні характеристики.

Керуючий вузол кластеру:

2x Intel® Xeon® CPU E5455, 16Gb memory, 2x 250Gb HDD

Операційна система: Scientific Linux, ядро 2.6.18-53.1.4.el5

Обчислювальні вузли (4 подвійних вузла):

Superserver 6015T-INFV - 4x Intel® Xeon® CPU E5440, 32Gb memory, 2x 250Gb HDD

Операційна система: Linux 3.1.5-gentoo-r7

Сховища даних (NAS, Samba, FTP, HTTP...)

4 штуки по 40, 20, 7.5, 5 терабайт RAID 6 (RAID 5)

1. 2 Xeon (4-core) E5620 (2.40Hz/12M), 16 GB RAM (модернізовані)

3. 2 Xeon (4-core) X5355 (2.66Hz/8M)), 10 GB RAM (модернізовані)

Інститут має у своєму розпорядженні два зовнішні підключення до провайдерів зв'язку УАРНЕТ та РЕТН ємністю 60 та 30 Мбіт/с. Інститут міститься на двох основних майданчиках в м. Харкові, які поєднано оптоволоконним лінком із спроможністю 10 Гбіт/с за сприяння оператора УАРНЕТ. Крім того, УАРНЕТ забезпечує 100 Мбіт/с з'єднання ЛОМ інституту із обсерваторією УРАН-4 в м. Одесі. Обсерваторії інституту в м. Зміїв, с. Мартова та м. Євпаторія мають власні підключення до інтернету через Укртелеком і Планар та під'єднуються до ЛОМ інституту за допомогою VPN. Головна проблема мережі – відсутність нормального зв'язку із обсерваторією УТР-2. (в даний момент швидкість до 100 Кб/с забезпечується безпроводовим провайдером «Інтертелеком»). Проте, ми не втрачаємо надії, що в майбутньому зможемо майже задарма створити 80-км канал передачі даних ємністю до 3 Гбіт/с.

Обчислювальний кластер має продуктивність 680 Гфлопс при роботі з 64-х розрядними числами. Він заснований на подвійних двопроцесорних платформах Superserver 6015T-INFV з двома процесорами Intel Xeon E5440 кожна. На периферійних обчислювальних станціях (нодах) кластера встановлена операційна система Linux 2.6.25-gentoo-r7. Кластер відповідає вимогам грид-вузла рівня Tier-3 за прийнятою в ЦЕРНі термінології.

Характеристика керуючої обчислювальної станції кластера: 2x Intel ® Xeon ® CPU E5455, 16 Гб ОЗУ, 30 Тб HDD. На керуючої обчислювальної станції кластера встановлена операційна система: Scientific Linux, ядро 2.6.18-53.1.4.el5
Характеристика периферійних обчислювальних станцій (нодів) кластера: Superserver 6015T-INFV 4x Intel ® Xeon ® CPU E5440, 32 Гб ОЗУ. Операційна система: Linux 2.6.25-gentoo-r7.

Обчислювальні станції функціонують у складі локальної обчислювальної мережі РІ НАНУ. Сервер «Cuda-1». Обчислювальна станція побудована з метою обробки масивів даних за рахунок програмно-апаратної архітектури паралельних обчислень графічного процесора NVIDIA. Характеристика обчислювальної станції: процесор Intel (R) Core (TM) i5-25000 CPU 3,30 ГГц, 16 Гб ОЗУ, графічна карта GTX 670, 8x3 Тб HDD.

Обчислювальна станція функціонує в складі локальної обчислювальної мережі РІ НАНУ. Сервер UTR-2 FS. Обчислювальна станція виконує завдання обробки та зберігання даних безпосередньо на радіотелескопі РІ НАНУ. Характеристика обчислювальної станції: процесор Intel Core i7-3770 3.4GHz/8MB, 32Гб ОЗУ, графічна карта GTX 680, 5x2 Тб HDD.

Обчислювальна станція функціонують у складі локальної обчислювальної мережі радіотелескопу УТР-2. Схема взаємодії серверів представлена на рис.3.1.

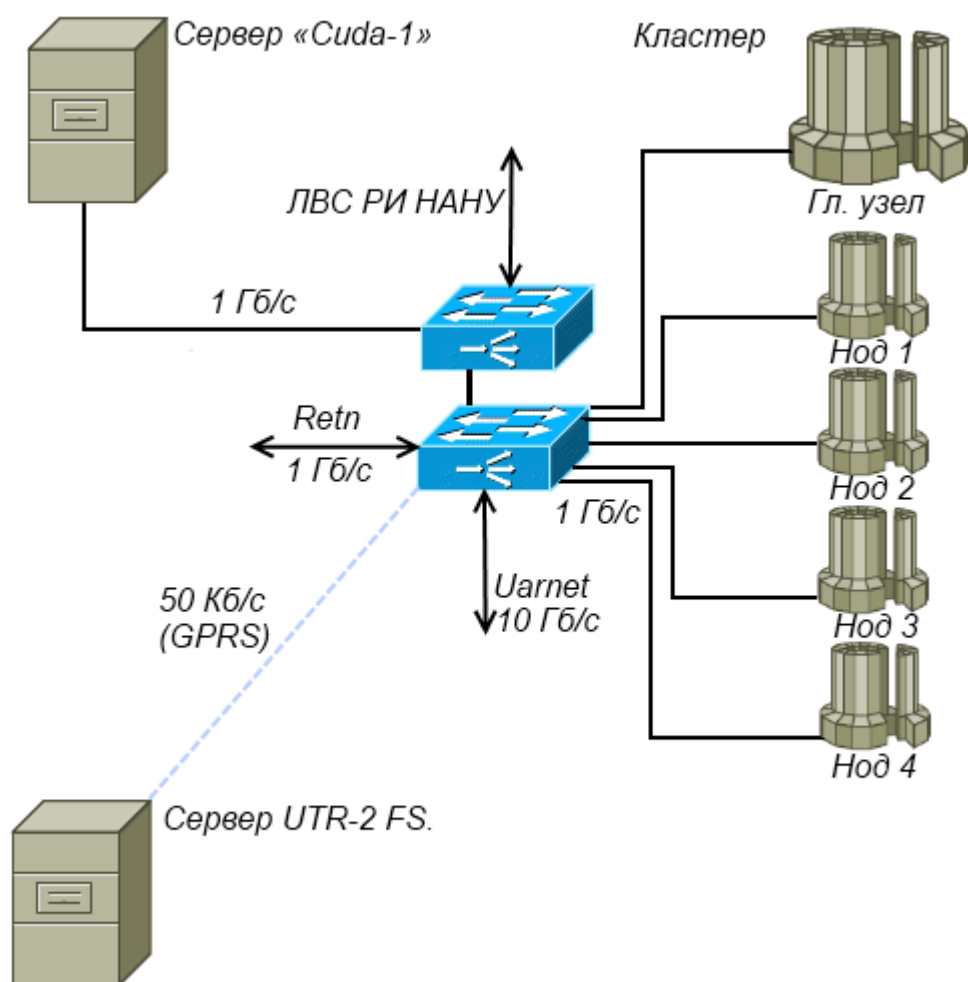


Рис.3.1. Взаємодія обчислювального кластеру та CUDA-серверів в рамках Радіоастрономічного інституту НАН України.

4. Висновки

В результаті виконання проекту вдалося значно пришвидшити та удосконалити процедуру обробки даних радіоастрономічних спостережень, прискорити чисельні розрахунки рухів в задачі багатьох тіл, будувати моделі молекул з внутрішньо молекулярними коливаннями великої амплітуди. Також завдяки збільшившимся можливостям ґрід-кластера значно пришвидшилось рішення задач дифракції для об'ємних періодичних структур, фотонних кристалів, завдань розробки метаматеріалів, а також зросли можливості зберігання великих обсягів інформації в задачах обробки зображень, пошуку астрономічних джерел і т.д.

Записані дані більше 50% обзору Північного неба з метою пошуку пульсарів і транзієнтних джерел в найближчому галактичному оточенні. Проводиться їх обробка.

Модернізовано обчислювальний ґрід-кластер РІ НАНУ за рахунок розширення файлового простору і придбання та налаштування сервера паралельної обробки великих об'ємів радіоастрономічних даних на основі GPU (CUDA) технологій. Це дозволить проводити пошуки транзієнтних джерел з великою швидкістю, або в псевдо on-line режимі (після з'єднання обсерваторії ім. С.Я. Брауде і ґрід-кластера РІ НАНУ оптоволоконною лінією зв'язку). Створена мапа яскравісної температури фону Північного неба в декаметровому діапазоні у міжнародних VoTable та FITS форматах, пристосованих для загального користування за допомогою веб-технологій. Каталог розширено розділами блискавок Сатурну і даними обробки сигналів пульсарів, отриманих за рахунок можливостей обробки більших масивів даних. Започатковано створення системи «Спеціалізована віртуальна обсерваторія» із залученням оптичних даних. Продовження цієї роботи дозволить зробити його інтерактивним і значно розширити його наповнення, зробивши його зручнішим у користуванні.

5. Перелік статей, що опубліковані за темою проекту, або є надісланими в наукові журнали, перелік доповідей, що зроблено на семінарах, конференціях

1. 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" (Секция «Современные информационные системы и технологии в управлении предприятиями и организациями») 17-19 апреля 2012 г. – Харьков: ХНУРЕ. – С. 122-123.

2. Ткачев В.Н., Саваневич В.Е., Анненков А.Б, Брюховецкий А.Б. Метод предотвращения возникновения коллизий при параллельной обработке данных в децентрализованных вычислительных системах // Науково-виробничий збірник "Наукові записки УНДІЗ". - № 2 (22). - 2012. - С. 110-116.

Готується до друку

3. Zakharenko V.V., Vasylieva I.Y., Konovalenko A.A., Ulyanov O.M. et al. Detection of decameter wavelength pulse radio emission of 40 known pulsars. MNRAS. подано до друку.

4. Захаренко В.В., Царин Ю.А., Ткачов В. М. Кулішенко С.Ф. Кулішенко Д.Ф. Яровой О.Г. Структура и задачи грид-кластера РИНАНУ. Радиофизика и радиоастрономия. Готується до друку

6. Додаток 1 Стислий перелік досягнутих результатів.

а. Перелік завдань і заходів (за Програмою), що виконувались з зазначенням коштів, що використані для виконання кожного з них.

Завдання	Заходи	Фінансування, тис. грн..		
			План	Факт
2. Розроблення і впровадження технологій функціонування грид-інфраструктури.	2.3 Дослідження і розробка методів і засобів об'єднання грид-технологій і технологій Веб-послуг, механізмів формування грид-послуги, як розширення Веб-послуги.	а.Кап. Вид.	0	0
		б.Пот. Вид	15,0	15,0
		Разом:	15,0	15,0
4. Розробка та впровадження грид-технологій в науково-технічну та соціально-економічну сфери діяльності.	4.1 Використання грид-технологій в фундаментальних наукових та науково-прикладних дослідженнях.	а.Кап. Вид.	29,0	29,0
		б.Пот. Вид	11,0	11,0
		Разом:	40,0	40,0
5. Розвиток засобів формування даних, їх збереження та інтелектуальної обробки, використання їх для створення різноманітних баз даних, що є елементами грид-інфраструктури.	5.2 Створення грид-банків даних (Розробка і створення грид-сховищ даних на основі кеш-серверних технологій для накопичення інформації і обробки даних).	в.Кап. Вид.	0	0
		г. Пот. Вид	10,0	10,0
		Разом:	10,0	10,0
Проект в цілому		Кап. Вид.	29,0	29,0
		Пот. Вид	36,0	36,0
		Разом:	65,0	65,0

б. Використання комп'ютерних ресурсів для отримання результатів

а-б. 29 тис. грн. капітальних видатків було використано на модернізацію обчислювального кластеру РІ НАН України. А саме, за 14.0 тис. грн. капітальних видатків придбан сервер з GPU (CUDA), а 15.0 тис. грн. капітальних видатків витрачено на модернізацію системи збереження даних обчислювального кластеру РІ. Створено нове сховище даних обсягом 24 ТБ, що дозволяє пришвидшити паралельну обробку великих масивів даних радіоастрономічних спостережень.

г. 18,835 тис. гривень, (решта – нарахування на зарплату 6,736, відрядження 5,048, оплата комунальних послуг 5,381 та накладні витрати 8,334) було витрачено на розробку власного ПЗ під Linux із можливістю паралелізації розрахунків. Це дозволило удосконалити і в декілька десятків разів пришвидшити обробку даних обзору. Використання потужностей графічних процесорів дозволило пришвидшити

обробку радіоастрономічних спостережень та моделювання рухів в системах багатьох тіл в декілька сот разів. Робочі станції було використано з високою ефективністю для розрахунків в задачах мікрохвильової спектроскопії, дифракції для об'ємних періодичних структур, обробки зображень, пошуку астрономічних джерел.

Таким чином, кластер академічного ґріда в інституті РІНАНУ був дуже ефективно використаний для вирішення різноманітних астрономічних і фізичних задач. Доцільність його подальшого розвитку незаперечна. Це буде сприяти збільшенню ефективності досліджень, проведених Радіоастрономічного інституту в різних областях радіофізики та радіоастрономії.